

Министерство образования и науки РФ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Уральский государственный педагогический университет»  
Институт математики, информатики и информационных технологий  
Кафедра высшей математики

**Построение корреляционной модели и  
статистический анализ данных по термодинамическим  
свойствам галогенидов щелочных металлов**

Выпускная квалификационная работа

Квалификационная работа

допущена к защите

Зав. кафедрой

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 г.

\_\_\_\_\_

подпись

Руководитель ОПОП

\_\_\_\_\_

подпись

Исполнитель:

Ушакова Люция Рашитовна

обучающийся группы БП-41

\_\_\_\_\_

подпись

Научный руководитель:

Бодряков В. Ю.

Заведующий кафедрой высшей  
математики

\_\_\_\_\_

подпись

## Оглавление

<b>Введение .....</b>	<b>3</b>
<b>ГЛАВА 1. Методы интеллектуальной обработки статистических данных исследования и модельные представления о них. Описание объектов исследования (Литературный Обзор).....</b>	<b>9</b>
1.1. Математические и компьютерные методы и средства поиска, обработки, анализа и интерпретации данных .....	9
1.2. Математические модели исследуемых свойств .....	13
1.3. Физические свойства и применения галогенидов цезия .....	19
<b>ГЛАВА 2. Построение корреляционной модели и статистический анализ данных по термодинамическим свойствам галогенидов щелочных металлов (на примере галогенидов цезия).....</b>	<b>23</b>
2.1. Первичные данные .....	23
2.2. Построение корреляционной модели и статистический анализ данных по теплоемкости и тепловому расширению галогенидов щелочных металлов на модельном примере CsCl.....	27
2.3. Построение корреляционной модели и статистический анализ данных по теплоемкости и тепловому расширению галогенидов цезия: CsBr, CsI, CsF.....	35
2.4. Краткие методические рекомендации по формированию у студентов вуза профессиональных компетенций, сопряженных с поиском, обработкой, анализом и интерпретацией данных .....	44
<b>Заключение.....</b>	<b>47</b>
<b>Библиографический список.....</b>	<b>50</b>
<b>Приложение 1 .....</b>	<b>59</b>
<b>Приложение 2 .....</b>	<b>62</b>
<b>Приложение 3 .....</b>	<b>65</b>
<b>Приложение 4 .....</b>	<b>66</b>
<b>Приложение 5 .....</b>	<b>68</b>
<b>Приложение 6 .....</b>	<b>72</b>
<b>Приложение 7 .....</b>	<b>73</b>
<b>Приложение 8 .....</b>	<b>77</b>
<b>Приложение 9 .....</b>	<b>79</b>
<b>Приложение 10 .....</b>	<b>80</b>
<b>Приложение 11 .....</b>	<b>83</b>

## Введение

Бурное, часто глобальное, развитие современных политических и экономических процессов, высоких технологий, массовых научных и промышленных исследований, порождает и требует осмысленного хранения, оперативной переработки и представления в приемлемом для человека формате больших, а в некоторых случаях – сверхбольших объемов информации. Источниками огромных объемов первичной информации являются социальные сети разных видов, данные электронной почты, Twitter, Wiki-проекты, компании сотовых операторов, телеметрические данные, информация с камер видеонаблюдения и т.п. За последнее время проблема больших данных (Big Data) оказалась в фокусе многих крупных компаний, большинство из которых инвестирует средства для проведения исследования проблем, связанных с Большими Данными [1–4]. В связи с интеллектуальным анализом данных часто используют также термин Data Mining.

Согласно исследованию [3] компании Xplenty (Тель-Авив, Израиль), специализирующейся на интеграции данных, треть специалистов по бизнес-аналитике тратит от 50 до 90% своего времени на очистку сырых данных и подготовку их к загрузке в платформу обработки данных компании. Проблема очистки (предварительной или первичной обработки) данных означает также, что некоторые из технических специалистов, пользующихся сегодня наибольшим спросом, тратят значительную долю своего времени на рутинную работу по сортировке и организации наборов данных, прежде чем они будут подвергнуты анализу. Это не очень хорошо масштабируется и серьезно ограничивает потенциал больших данных. По мере сбора все большего и большего объема данных (с помощью Интернета) трудности только усугубляются.

Специфика современных условий анализа данных такова:

- Данные имеют неограниченный объем;

- Данные являются разнородными (количественными, качественными, текстовыми);
- Результаты должны быть конкретны и понятны;
- Инструменты для обработки сырых данных должны быть просты в использовании.

Возможно, что в будущем будут созданы эффективные программное обеспечение (ПО) и алгоритмы для очистки, сортировки и категоризации данных. Это обязательно произойдет, но следует также ожидать, что это не станет универсальным решением. В настоящее же время, три ведущие корпорации мира в области автоматизации и написания алгоритмов Microsoft, IBM и Amazon делают ставку на использование людей для маркировки данных, с чем не может справиться ПО.

Как отмечают исследователи вопроса, на рынке труда наблюдается острый устойчивый дефицит профессионалов, способных к интеллектуальному анализу данных практически во всех отраслях. Так, в работе [5] директор по глобальному маркетингу компании Travelex (Лондон, Великобритания) Доминик Граунсел поднимает проблему того, что сегодня маркетинг нуждается в людях с техническим складом ума. По мнению Граунсела, маркетингу нужны люди, способные справиться с огромным потоком данных, произвести комплексный анализ и понять техническую природу digital-каналов. Для восполнения дефицита специалистов-аналитиков уже разрабатываются специальные обстоятельные учебные курсы, как зарубежные, так и отечественные [6–9]. В частности, в [8, с.5] отмечено, что «темпы жизни общества, экономики, а также всех видов социальной деятельности в настоящее время чрезвычайно ускорились и продолжают ускоряться, обществом востребованы специалисты, способные принимать решения быстро, опираясь на свой опыт и уже известные знания прошлого. Проблема быстрого принятия оптимального решения наталкивается на существенное препятствие – отсутствие специальной подготовки основной

массы специалистов высшего профессионального образования к поиску и обработке огромных массивов уже имеющейся информации».

Сказанное исчерпывающе свидетельствует в пользу актуальности подготовки профессионалов в области поиска, обработки, анализа и интерпретации информации, особенно в тех случаях, когда требуется предварительная очистка, сортировка и категоризации данных. Для того, чтобы эта работа была результативной и эффективной, специалист указанного профиля должен не только свободно владеть современными средствами поиска, обработки, анализа и интерпретации информации, но и быть способен в достаточной степени понять предметную сторону статистических данных для анализа. Не бывает данных «вообще», данные всегда предметны и специфичны для порождающего их источника. Представляется, что одним из наиболее оптимальных для такой работы является образование на стыке математики и информатики и ИКТ, такое как направление подготовки «01.03.02 – Прикладная математика и информатика» [10], реализуемое в Институте математики, информатики и информационных технологий (ИМИиИТ) ФГБОУ ВО «Уральский государственный педагогический университет» (УрГПУ).

В ИМИиИТ УрГПУ по направлению подготовки «01.03.02 – Прикладная математика и информатика» в качестве вида профессиональной деятельности выбрана научно – исследовательская деятельность. В соответствии с выбранным видом профессиональной деятельности, выпускник, освоивший программу бакалавриата, должен быть готов решать профессиональные задачи, непосредственно связанные с анализом данных, такие как:

- изучение новых научных результатов, научной литературы или научно-исследовательских проектов в соответствии с профилем объекта профессиональной деятельности;
- изучение информационных систем методами математического прогнозирования и системного анализа;

- исследование и разработка математических моделей, алгоритмов, методов, программного обеспечения, инструментальных средств по тематике проводимых научно-исследовательских проектов;
- составление научных обзоров, рефератов и библиографии по тематике проводимых исследований;
- подготовка научных и научно-технических публикаций;
- участие в работе научных семинаров, научно-тематических конференций, симпозиумов.

Федеральный государственный стандарт высшего профессионального образования (ФГОС ВО) по направлению «01.03.02 – Прикладная математика и информатика» [10] регламентирует в пп. 5.1, 5.2 общепрофессиональные и профессиональные компетенции, которыми должен обладать выпускник:

- способность использовать базовые знания естественных наук, математики и информатики, основные факты, концепции, принципы теорий, связанных с прикладной математикой и информатикой (ОПК-1);
- способность приобретать новые научные и профессиональные знания, используя современные образовательные и информационные технологии (ОПК-2);
- способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-3);
- способность собирать, обрабатывать и интерпретировать данные современных научных исследований, необходимые для формирования выводов по соответствующим научным исследованиям (ПК-1);

- способность понимать, совершенствовать и применять современный математический аппарат (ПК-2).

**Объектом** данного исследования является методика прикладного интеллектуального анализа, а именно, поиска, обработки, анализа и интерпретации статистических данных по термодинамическим свойствам твердых тел.

**Предметом** исследования является методика статистической обработки данных по термодинамическим свойствам галогенидов щелочных металлов на примере галогенидов цезия («цезидов»).

Как показано далее, соединения цезия вида  $CsX$ , где галогенид  $X = F, Cl, Br, I$  («цезиды»), представляют не только научный интерес в качестве простых моделей твердых тел с ионным типом кристаллической связи, но и имеют довольно обширные приложения, спектр которых может еще значительно расшириться благодаря уточнению их базовых термодинамических свойств в настоящей работе. Сказанное обосновывает выбор темы выпускной квалификационной работы (ВКР): «Построение корреляционной модели и статистический анализ данных по термодинамическим свойствам галогенидов щелочных металлов».

Согласно букве и духу профильного ФГОС ВО по направлению подготовки «01.03.02 – прикладная математика и информатика» **целью** ВКР является формирование и развитие указанных и других общепрофессиональных и профессиональных компетенций.

Для достижения цели решались следующие **задачи**:

1. Освоение математических инструментов для обработки и анализа статистических данных.
2. Освоение компьютерных средств для поиска, обработки, анализа и интерпретации статистических данных (пакеты MS Word, MS Excel).
3. Освоение математической модели исследуемого явления, порождающего статистические данные для анализа

(термодинамическая модель формирования теплоемкости и коэффициента теплового расширения твердого тела).

4. Оценка практической значимости исследуемых веществ для создания новых материалов и устройств.
5. Поиск и предварительный анализ первичных данных исследований (температурные зависимости теплоемкости и коэффициента теплового расширения CsCl, CsBr, CsI, CsF). Фиксация результатов поиска в файлах MS Word и MS Excel. Создание коллекции первичных данных.
6. Углубленный статистический анализ первичных данных (построение усредняющего тренда, сглаживание, корреляционный анализ, прогнозирование).
7. Формулирование содержательных выводов по результатам обработки и анализа данных.
8. Формулирование кратких методических рекомендаций по формированию у студентов вуза профессиональных компетенций для студентов, сопряженных с поиском, обработкой, анализом и интерпретацией данных.

**Гипотеза** исследования: между температурными зависимостями теплоемкости  $C(T)$  и объемного коэффициента теплового расширения  $\alpha(T)$  твердых тел, в том числе, исследуемых здесь «цезидов», существует выраженная корреляционная зависимость  $\alpha(T)$  вплоть до температур плавления тел  $T_m$ . Причем, эта корреляционная зависимость  $\alpha(C)$  «би-линейна» с изломом вверх, приходящемся на температуру, порядка температуры Дебая  $\theta$  и при достижении теплоемкостью своего классического предела Дюланга и Пти. Основанием для выдвижения гипотезы являются предшествующие исследования руководителя [11–23], и совместные с руководителем публикации автора настоящей выпускной квалификационной работы [24–28].



# **ГЛАВА 1. Методы интеллектуальной обработки статистических данных исследования и модельные представления о них. Описание объектов исследования (Литературный Обзор)**

## ***1.1. Математические и компьютерные методы и средства поиска, обработки, анализа и интерпретации данных***

В основе практически всех процедур, сопряженных с поиском, анализом, обработкой и интерпретацией информации (данных) лежит статистика. Статистика – это наука о сборе, измерении и анализе больших массивов количественных данных. Математическая статистика – раздел математики, изучающий математические методы обработки, сбора, систематизации и обработки результатов статистических данных. Можно сказать, что математическая статистика создает и обосновывает математический инструментарий для статистики [29–32].

Следуя определению работы [8, с. 40], примем, что «Информация – это совокупность собранных и аналитически обработанных сведений, требующихся для принятия оптимального решения при устранении некоторой проблемы, а также сам процесс передачи или получения этих сведений». Упомянутые сведения будем считать синонимичными понятию «данные». Говоря кратко, в собственном смысле информация – это аналитически обработанные данные. Статистическими данными назовем информацию об объектах в какой-либо достаточно обширной совокупности, обладающей специфицированными признаками. Как и другим объектам человеческой деятельности, информации присуще такое свойство как качество. Качество информации – это степень развитости свойств информации, определяющая её практическую пригодность для исследования с целью принятия решения. Качество информации зависит от следующих характеристик: полезность (важность); своевременность; достоверность; полнота [8, с. 44]. Отметим, что получение качественной информации требует значительных усилий; нередко такая информация требует применения серьезных мер защиты [32, 33].

Под анализом информации будем понимать совокупность методов обработки фактических данных, обеспечивающих их сравнимость (сопоставимость), объективную оценку и выработку новой выводной информации. Выработка новой информации – это извлечение содержания из всей массы исходных данных, отыскание причинно-следственных и пространственно-временных связей и взаимосвязей между сопоставляемыми сведениями.

Наиболее ценная информация может быть получена из следующих источников или их комбинаций:

- компетентные люди (эксперты);
- документы (документальные источники) – отчёты, обзоры, статьи, книжные издания, и др.,
- средства беспроводной и проводной связи (телефоны, телефаксы, радиостанции, телевизионные каналы, электронная почта и др.),
- электронные системы обработки информации (компьютеры, глобальные и локальные компьютерные сети и др.).

Все указанные источники информации были задействованы при подготовке настоящей выпускной квалификационной работы. С учетом контекста выпускной работы и направления подготовки автора наиболее интенсивно были задействованы возможности, предоставляемые глобальной сетью Интернет. Согласно определению из Википедии ([ru.wikipedia.org](http://ru.wikipedia.org)), Интернет (Internet, (Всемирная) Сеть) – всемирная система объединённых компьютерных сетей, построенная на использовании протокола IP и маршрутизации пакетов данных. Информация в Интернете представлена в источниках самого разного типа. Часто Интернет отождествляют со Всемирной Паутиной WWW – самым популярным фрагментом Сети. На самом деле в Сети существует информационная и коммуникационная среда ресурсов самых различных типов [34, 35].

Поиск необходимой первичной информации осуществлялся в Сети с помощью информационно-поисковых систем (ИПС, поисковые машины, поисковики), главным образом, Google. Google – первая по популярности в мире поисковая система, обрабатывающая более 40 миллиардов запросов в месяц. Поисковой системой Google владеет корпорация Google, Inc. Лидер поисковых машин Интернета, Google занимает более 60% мирового рынка и индексирует более 8 миллиардов Web-страниц. Google может находить информацию на 186 языках (на 15 октября 2009). Google поддерживает поиск в документах форматов PDF, RTF, PostScript, Microsoft Word, Microsoft Excel, Microsoft PowerPoint и других и использует при поиске информации идею о том, что Web-страница должна считаться тем «важнее», чем больше на неё ссылаются других страниц, и чем более «важными» в свою очередь являются эти страницы [36].

В контексте настоящей данной ВКР были использованы следующие статистические инструменты обработки данных [29–31]:

- построение эмпирических (первичных) температурных зависимостей теплоемкости и коэффициента теплового расширения объектов изучения;
- усреднение первичных значений теплоемкости и КТР с оценкой среднеквадратических отклонений (СКО);
- численные методы, в частности, численное интегрирование и численное дифференцирование (по пятиточечным формулам);
- метод наименьших квадратов (МНК);
- построение сглаживающей линии тренда, обеспечивающей оптимальное (в смысле наименьшего СКО) описание эмпирических значений исследованных свойств;
- корреляционный анализ.

Дадим краткую характеристику двум последним [29–31]. **Линия тренда** – инструмент в техническом анализе, предназначенный для определения направления общей тенденции изучаемой величины  $Y$  в функции независимой переменной  $X$ , идентификации участков ускорения или замедления темпа изменения  $Y(X)$ , изменения направления тенденции  $Y(X)$ . **Корреляционный анализ** – метод обработки статистических данных, посредством которого измеряется теснота связи между двумя или более переменными. Корреляционный анализ тесно связан с регрессионным анализом, с его помощью определяют необходимость включения тех или иных факторов в уравнение множественной регрессии, а также оценивают полученное уравнение регрессии на соответствие выявленным связям. Наибольший интерес, как правило, представляет линейный регрессионный анализ, где в качестве меры тесноты корреляционной связи используется квадрат коэффициента линейной корреляции  $R^2$ .

Углубленный статистический анализ данных является одним из необходимых этапов едва ли не каждого фундаментального научного исследования. Долгое время такой анализ данных был посилен лишь узкому кругу посвященных специалистов, так как данная работа требовала серьезной и обстоятельной предварительной подготовки и длительного обучения. Вместе с тем, к настоящему времени разработаны современные специализированные компьютерные программы (программное обеспечение, ПО) обработки данных, которые позволили далеко шагнуть вперед в расширении возможностей по статистической обработке данных, и потенциально доступны значительно более широкому кругу специалистов, чем прежде. Отличным программным инструментарием являются пакеты прикладных программ, имеющие огромное количество встроенных функций, с помощью которых можно проводить обработку и анализ статистических данных. Можно выборочно указать следующие специализированные программы для статистической обработки данных: MS Excel (разработчик: MS Windiws; профиль: универсальный. Адрес: [www.microsoft.com](http://www.microsoft.com)); Analyse-it

(разработчик: Analyse-it; дополнение к Excel; профиль: универсальный. Адрес: [www.analyse-it.com](http://www.analyse-it.com)); XLSTAT (разработчик: Addinsoft, Inc.; дополнение к Excel; профиль: универсальный. Адрес: [www.xlstat.com](http://www.xlstat.com)); Statistica (разработчик: StatSoft; профиль: универсальный. Адрес: [www.statsoft.com](http://www.statsoft.com)), SPSS (разработчик: SPSS, Inc.; профиль: социология, эконометрика. Адрес: [www.spss.com](http://www.spss.com)).

Электронный табличный процессор MS Excel входит в состав пакета MS Office и является одним из наиболее популярных и востребованных программных продуктов компании Microsoft [37]. Пакет был выбран в настоящей ВКР как основной инструмент обработки и анализа статистических данных по термодинамическим свойствам объектов исследования (галогенидов цезия) благодаря удобству и сравнительной простоте в использовании. Современное доступное и при этом обстоятельное описание работы с Excel можно найти, например, в руководстве [38]. Отметим, что описание даже малой части весьма широких расчетных возможностей электронной таблицы не может быть сделано сколько-нибудь обстоятельно в рамках данной ВКР, поэтому ограничимся лишь несколькими выборочными ссылками на руководства по эксплуатации MS Excel [38–40].

## ***1.2. Математические модели исследуемых свойств***

В настоящем разделе кратко укажем основные математические модели, лежащие в основе представлений об изучаемых термодинамических свойствах твердых тел, прежде всего, теплоемкости и коэффициенте теплового расширения. Хотя полученные далее результаты по температурным и корреляционным зависимостям этих свойств не требуют привлечения каких-либо конкретных моделей их формирования, представляется, тем не менее, необходимым дать общее представление о них.

В основе современных представлений о термодинамическом состоянии немагнитного вещества, находящегося в твердом агрегатном состоянии (твердом теле) лежит представление о том, что состояние вещества может

быть описано с помощью функции состояния – термодинамического потенциала, зависящего от свободно (в известных пределах) варьируемых независимых термодинамических переменных: температуры  $T$  и давления  $P$  (или объема  $V$ ) [21, 41– 46]. Для магнитоактивных веществ добавляется еще одна независимая переменная – магнитное поле  $H$ . Говоря математическим языком, характерной особенностью термодинамических потенциалов является то, что они имеют полные дифференциалы. Иными словами, интеграл от них по замкнутому контуру равен нулю, или, что то же, их величина зависит лишь от начального  $(T_1, P_1, \dots)$ , и конечного  $(T_2, P_2, \dots)$ , набора независимых переменных  $(T, P, \dots)$ , но не от пути перехода из термодинамического состояния 1 в состояние 2. Термодинамические потенциалы широко и результативно применяются на практике при проведении расчетов фазовых равновесий и диаграмм, металлургических и др. инженерных процессов, связанных с воздействием высоких температур и давлений, уравнений состояний тел и термодинамических систем, геологических процессов и др.

Для рассмотрения немагнитных твердых тел, какими являются и объекты настоящего исследования (галогениды цезия), наиболее удобным является молярный термодинамический потенциал Гиббса  $\Phi(T, P)$ . Его полный дифференциал в функции независимых переменных  $(T, P)$  может быть представлен в виде:

$$d\Phi = -SdT + VdP, \quad (1)$$

где  $S$  – молярная энтропия,  $T$  – температура,  $V$  – молярный объем,  $P$  – давление. Конкретное выражение для термодинамического потенциала (ТДП) Гиббса  $\Phi(T, P)$  может быть получено в рамках той или иной микроскопической модели, так или иначе определяющей характер (потенциальную энергию) взаимодействия атомов твердого тела на микроскопическом уровне. В качестве таких моделей можно указать модель Дебая, модель парного взаимодействия атомов типа Ван-дер-Ваальса, модель парного

взаимодействия атомов кулоновского типа и др. [47, 48]. Последний тип характерен именно для галогенидов щелочных металлов.

Построение и анализ реалистичных микроскопических моделей твердого тела представляет собой весьма непростую задачу и является прерогативой профессиональных физиков – теоретиков; это не было предметом настоящей выпускной работы. Вместе с тем, если модель построена, и выражение для термодинамического потенциала получено, то дальнейший термодинамический анализ вполне доступен для студентов, обучающихся по направлениям подготовки, не подразумевающим профессиональные занятия теоретической физикой, например, студентам, обучающимся по направлению «01.03.02 – Прикладная математика и информатика», или студентам инженерных направлений подготовки.

Из выр. (1) дифференцированием молярного ТДП  $\Phi(T, P)$  получаются выражения для первых термодинамических производных, соответственно, молярной энтропии и молярного объема, соответственно,

$$S = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_P; \quad (2)$$

$$V = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial P}\right)_T. \quad (3)$$

В отличие от энтропии, которая не может быть непосредственно измерена, молярный объем допускает прямое измерение. Например, молярный объем  $V$  может быть вычислен на основании данных рентгенографического измерения параметра решетки  $a$ ; непосредственно, например, с помощью  $\gamma$ -плотномера, может быть измерена плотность вещества (денситометрия):

$$\rho = \mu/V, \quad (4)$$

где  $\mu$  – молярная масса, и др. К первым термодинамическим производным также относят молярную энтальпию (теплосодержание) тела:

$$H = \Phi + TS = \Phi - T\left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_P. \quad (5)$$

В калориметрических опытах с падающим образцом (дроп-калориметрия), в массивный, обычно, медный, калориметр в адиабатической оболочке падает образец нагретый в печи до заданной температуры  $T$ , изменение энтальпии может быть непосредственно измерено по повышению температуры калориметра  $\Delta T$ . Величина  $\Delta T$  невелика (из-за большой массы калориметра) и может быть прецизионно измерена. При достаточно точном измерении температурной зависимости  $H(T)$  термодинамический потенциал Гиббса  $\Phi$  вычисляется интегрированием дифференциального уравнения в частных производных (5).

Двукратное дифференцирование ТДП  $\Phi(T, P)$  дает выражения для его вторых термодинамических производных, представляющих обычно наибольший практический интерес [49, 50]. Соответственно, для (изобарической) молярной теплоемкости  $C(T)$ , объемного коэффициента теплового расширения (ОКТР)  $\alpha(T)$  и (изотермической) сжимаемости  $\kappa(T)$ :

$$C = \left( \frac{\partial H}{\partial T} \right)_P = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_P = -T \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} \right)_P; \quad (6)$$

$$\alpha = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial T \partial P}; \quad (7)$$

$$\kappa = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial P^2} \right)_T. \quad (8)$$

Для молярной теплоемкости  $C(T)$ , определенной выр. (6) в условиях постоянства давления, часто используют обозначение  $C_P(T)$ , подчеркивая указание на условия ее определения – при  $P = \text{Const}$ . Молярная теплоемкость  $C_V(T)$  может быть определена также в условиях  $V = \text{Const}$ :

$$C_V = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V. \quad (9)$$

Между двумя теплоемкостями существует термодинамическое соотношение:

$$C_P - C_V = T V \alpha^2 K, \quad (10)$$

где изотермический модуль всестороннего сжатия (МВС)  $K(T) = 1/\kappa(T)$  обратен изотермической сжимаемости. Величина  $C_P(T) \equiv C(T)$  может быть



непосредственно измерена в калориметрических опытах (с применением адиабатического или изотермического калориметров, методом непрерывного нагрева, методом дифференциального термического анализа и др.). Величина  $C_V(T)$ , фактически непосредственно с приемлемой точностью измерена быть не может и представляет, главным образом, теоретический интерес. В частности, согласно закону Дюлонга и Пти изохорическая молярная теплоемкость  $C_V(T)$  простого твердого тела при температурах выше или порядка температуры Дебая  $\theta$  «выходит» на классический предел Дюлонга и Пти  $C_{DP} = 3R$ , где универсальная газовая (термодинамическая) постоянная  $R = 8,31441$  Дж/(моль К). Температура Дебая  $\theta$  разделяет температурный диапазон твердого состояния вещества на условно классическую высокотемпературную область ( $T \geq \theta$ ) и квантовую низкотемпературную область ( $T \ll \theta$ ). В низкотемпературной области теплоемкости  $C_P(T)$  и  $C_V(T)$  практически совпадают и изменяются с температурой пропорционально ее третьей степени:  $C \sim T^3$  («закон кубов» Дебая).

Объемный коэффициент теплового расширения  $\alpha(T)$  может быть вычислен по определению (7) численным дифференцированием измеренной температурной зависимости молярного объема  $V(T)$ , что бывает чаще, вычислен по измеренным линейным коэффициентам теплового расширения (ЛКТР)  $\alpha(T)$  кристалла в различных кристаллографических направлениях:

$$\alpha(T) = \frac{1}{l} \left( \frac{\partial l}{\partial T} \right)_P, \quad (11)$$

где  $l$  – длина образца в заданном направлении. Для кристаллов с кубической структурой типа CsCl (или NaCl) ОКТР и ЛКТР различаются втрое:

$$\alpha(T) = 3\alpha(T). \quad (12)$$

Заметим, что прецизионные измерения коэффициента теплового расширения предъявляют гораздо более жесткие требования к качеству приготовления образцов для измерений, чем калориметрические измерения.

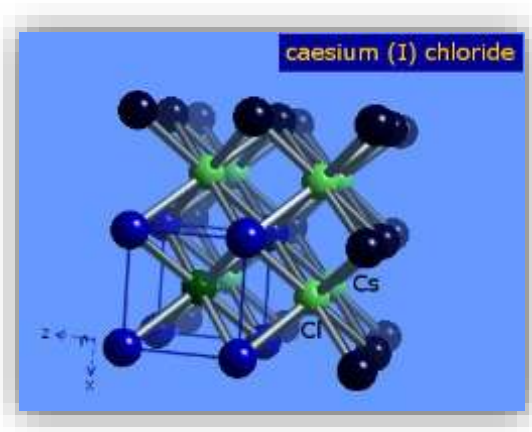
Модуль всестороннего сжатия  $K(T)$  (или изотермическую сжимаемость  $\kappa(T)$ ) обычно измеряют путем определения скоростей распространения ультразвуковых волн в кристалле в различных направлениях.

### 1.3. Физические свойства и применения галогенидов цезия

#### Хлорид цезия ( $\text{CsCl}$ )

Хлорид цезия - соединение с ярко выраженной ионной структурой, в которой каждый ион цезия  $\text{Cs}^+$  окружен восемью ионами хлора  $\text{Cl}^-$ . Элементный состав соединения: Cs 78,94 %, Cl 21,06 %.

Кристаллическая структура  $\text{CsCl}$  выбрана в качестве типовой кубической объемноцентрированной кристаллической решётки для соединений вида AX (тип  $\text{CsCl}$ ), где центральный атом A (Cs) окружён восемью атомами (группами атомов) X (Cl).



Хлорид цезия в нормальных условиях представляет собой бесцветное (в крупно - кристаллическом виде) или белое (в виде порошка) соединение, хорошо растворимое в воде (186,5 грамм  $\text{CsCl}$  в 100 г  $\text{H}_2\text{O}$  при 20 °C, 250 г при 80 °C, 270,5 г при 100 °C).

Хлорид цезия отвечает предъявляемым требованиям для высокоскоростного фракционирования ДНК, РНК, некоторых белков и нуклеотидов. Хлорид цезия используется как химический стандарт для калибровки калориметров по температуре и теплоемкости.

Терапевтические свойства хлорида цезия были обнаружены ещё в 1888 году в лаборатории И.П.Павлова С.С. Боткиным. Соединение обладало выраженным гипертензивным и сосудосуживающим действием и было использовано для лечения нарушений сердечно - сосудистой системы.

Несколько клинических испытаний показали, что хлорид цезия может быть использован при комплексной терапии некоторых форм рака. Однако использование этого препарата было связано со смертью 50 пациентов, когда он был использован как часть научно непроверенного лечения рака. По мнению American Cancer Society русск., существующие научные данные не дают оснований полагать, что нерадиактивные добавки хлорида цезия оказывают эффект на опухоли.

Также в США был выдан патент на использование соединения в качестве стимулятора нервной системы. Отмечается, что CsCl очень эффективен для регулирования сердечной аритмии. В районах мира с повышенным содержанием солей цезия в рационе питания было отмечено увеличение продолжительности жизни. По предварительным экспериментальным данным хлорид цезия и другие его соли могут быть полезны для лечения маниакально-депрессивных расстройств.

Помимо обычного хлорида цезия, отдельное применение в лучевой диагностике и радиотерапии находит  $^{137}\text{CsCl}$  — хлорид металла, в котором используется радиоактивный изотоп цезия  $^{137}\text{Cs}$ . Другой радиоизотоп цезия  $^{131}\text{Cs}$  в виде хлорида также применяется как лечебно-диагностическое средство в брахитерапии и, в частности, прямой диагностики инфаркта миокарда.

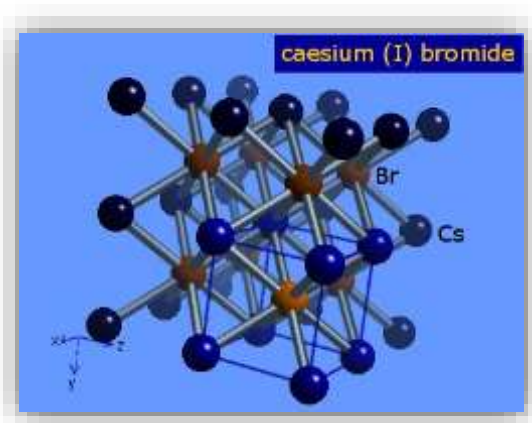
Используется для покрытия сварочных электродов. Применяют как компонент специальных стекол и эвтектических композиций для аккумуляторов тепла; оптический материал [51, 52].

#### Бромид цезия ( $\text{CsBr}$ )

Бромид цезия — соединение с ярко выраженной ионной структурой (ионный кристалл), где каждый ион цезия  $\text{Cs}^+$  окружен восемью ионами брома  $\text{Br}^-$ . Элементный состав соединения: Cs 62,45 %, Br 37,55 %.

Бромид цезия в нормальных условиях представляет собой бесцветное или белое соединение хорошо растворимое в воде.

Кристаллическая решётка CsBr — кубическая объемноцентрированная типа CsCl.



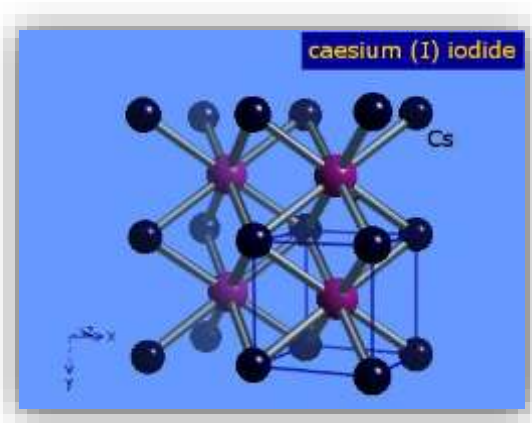
Входит в состав люминофоров для люминесцентных экранов, используемых в радиографии;

Применяют как компонент специальных керамических материалов и стекол; пары - рабочее тело в плазменных СВЧ-установках;

Бромид цезия применяется в качестве оптических материалов в специальной оптике — инфракрасные приборы, очки и бинокли ночного видения, прицелы, обнаружение техники и живой силы противника (в том числе из космоса) [51, 52].

#### Иодид цезия (CsI)

Иодид цезия — неорганическое соединение, соль цезия и иодистоводородной кислоты с химической формулой CsI, хорошо растворим в воде.

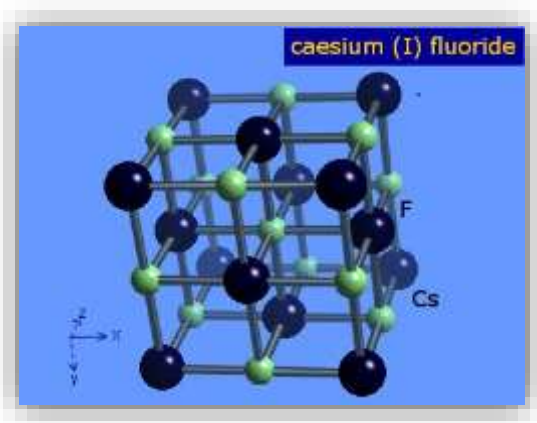


Йодид цезия в виде монокристаллов, является чрезвычайно важным и чувствительным материалом в области регистрации излучений (для этого он активируется таллием). Детекторы частиц на его основе применяются в атомной технике, геологии, медицине, космических исследованиях. Так например измерения элементного состава поверхности Марса выполнялись с помощью гамма спектрометра на основе CsI (Tl), установленного на космическом орбитальном аппарате «Марс-5».

Йодид и бромид цезия применяются в качестве оптических материалов в специальной оптике — инфракрасные приборы, очки и бинокли ночного видения, прицелы, обнаружение техники и живой силы противника (в том числе из космоса) [51, 52].

#### Фторид цезия (CsF)

Фторид цезия — неорганическое соединение, соль цезия и плавиковой кислоты с химической формулой CsF, хорошо растворим в воде, образует кристаллогидраты.



Фторид цезия является катализатором в органическом синтезе.

Используется для покрытия сварочных электродов. Применяют как компонент специальных стекол и эвтектических композиций для аккумуляторов тепла; оптический материал; для генерации анионов из перфторолефинов [51, 52].

## ГЛАВА 2. Построение корреляционной модели и статистический анализ данных по термодинамическим свойствам галогенидов щелочных металлов (на примере галогенидов цезия)

### 2.1. Первичные данные

Таблица 1

Характеристика работ по исследованию теплоемкости CsCl [53-58].

Ссылка	Метод исследования	Температурный диапазон, К	Характеристика образца, погрешность
A. R. Taylor, Jr., T. E. Gardner, and D. F. Smith. [53], 1963	Адиабатический калориметр	7-300	Содержание примесей: Al, Ca, Rb, K (0,001-0,01 %)
L. M. Tiwari and B. Sharan [54], 1965	методом Келлермана	0-100	
Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев [56], 1981		100-1700	
J. C. Ho and D. P. Dandekar. [57], 1984	Метод адиабатических тепловых импульсов и германий термометрии	2-24	

Таблица 2

Характеристика работ по исследованию теплового расширения CsCl [59-66].

Ссылка	Метод исследования	Температурный диапазон, К	Характеристика образца, погрешность
A. C. Bailey & B. Yates [59], 1967	Интерферометрический метод	20 - 273	Погрешность измерений 2-3%.
H. T. Fullam [60], 1972	Термомеханический анализатор (ТМА)	298-743	Получен: коммерчески Содержание примесей: Na, K, Ca (<0,02%).
Rapp, J. E. Merchant, H. D. [61], 1973	Высокоточный дифференциальный dilatометр в сочетании с электронным микрометром	70-570	
K.K. Srivastava, H.D. Merchant, [62], 1973	Метод рентгеновской дифрактометрии	50-100 ~ Тпл.	
V. Ganesan, K. S. Girirajan. [64], 1986	Метод дифрактометрии	60-240	

Таблица 3

Характеристика работ по исследованию теплоемкости CsBr [67, 56, 68].

Ссылка	Метод исследования	Температурный диапазон, К	Характеристика образца, погрешность
M. Sorai, Hiroshi Suga and Syuzo Seki [67], 1967	Адиабатический калориметр	1,5 – 300	Получен: Mitsuwa's Pure Chemicals Содержание примесей: K, Na, Rb, Ca, Mg, Al (<0,01%).
В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев [56], 1981		0 – 910	
Rajiv Kohli [68], 1994	Дифференциальный сканирующий калориметр (ДСК)	310-780	Получен: коммерчески (99,9%).

Таблица 4

Характеристика работ по исследованию теплового расширения CsBr [69-72, 59, 73, 62, 74-75, 63, 65-66, 76]

Ссылка	Метод исследования	Температурный диапазон, К	Характеристика образца, погрешность
Johnson J W, Agron P A and Bredig M A [69], 1955	Метод дифрактометрии		
G. K. White., [72], 1965	Дифференциальная камера	2-30	
A. C. Bailey & B. Yates [59], 1967	Интерферометрический метод	20 - 273	Погрешность измерений 2-3%.
P. D. Pathak and N.G.Vasavada, [73], 1970	Метод дифрактометрии		Получен: Merck or B.D.H. Погрешность измерений 0,5%.
K.K. Srivastava, H.D. Merchant, [62], 1973	Метод рентгеновской дифрактометрии	50-100 ~ Тпл.	
G. K. White and J. G. Collins, [74], 1973	Дилатометрический метод	1,5-30; 54-90	Погрешность измерений $\pm 5\%$ .
Новицкий Л.А., Кожевников И.Г. [75], 1975		0-300	



Таблица 5

Характеристика работ по исследованию теплоемкости CsI [53, 67, 77, 56, 78].

Ссылка	Метод исследования	Температурный диапазон, К	Характеристика образца, погрешность
A. R. Taylor, Jr., T. E. Gardner, and D. F. Smith. [53], 1963	Адиабатический калориметр	13-300	Содержание примесей: Ca, Na (0,001-0,01 %), Al, K (0,0001-0,001 %)
M. Sorai, Hiroshi Suga and Syuzo Seki [67], 1967	Адиабатический калориметр	1,5 – 300	Получен: Mitsuwa's Pure Chemicals Содержание примесей: K, Na, Rb, Ca, Mg, Al (<0,01%).
B. J. Marshall and J. R. Kunkel. [77], 1969	Вакуумный калориметр	2,13 – 10	Получен: Harshaw Chemical Company

Таблица 6

Характеристика работ по исследованию теплового расширения CsI [59, 62, 74, 63, 65, 66].

Ссылка	Метод исследования	Температурный диапазон, К	Характеристика образца, погрешность
Bailey A C and Yates B. [59], 1967	Интерферометрический метод	20 - 273	Погрешность измерений 2-3%.
K.K. Srivastava, H.D. Merchant. [62], 1973	Метод рентгеновской дифрактометрии	50-100 ~ Тпл.	
G. K. White and J. G. Collins [74], 1973	Дилатометрический метод	1,5-30; 54-90	Погрешность измерений $\pm 5\%$ .

Таблица 7

Характеристика работ по исследованию теплоемкости CsF [79-81, 56, 82-83].

Ссылка	Метод исследования	Температурный диапазон, К	Характеристика образца, погрешность
Arnold M. Karo [79], 1960		0-300	
И.Е. Пауков, Ф.С. Рахменкулов. [80], 1969	Калориметр	13-300	Получен: марка «о.с.ч» Содержание примесей: <0,03%
Alexander.C. Macleod. [81], 1973	Адиабатический калориметр	500-1600	Погрешность измерений $\pm 1\%$ .

O. Beneš , R.J.M. Konings , D. Sedmidubský , M. [82], 2013	Адиабатический калориметр	5-1400	Получен: Alpha Aesar.
--	---------------------------	--------	-----------------------

Таблица 8

Характеристика работ по исследованию теплового расширения CsF [74].

Ссылка	Метод исследования	Температурный диапазон, К	Характеристика образца, погрешность
G. K. White and J. G. Collins [74], 1973	Дилатометрический метод	1,5-30; 54-90	Погрешность измерений $\pm 5\%$ .

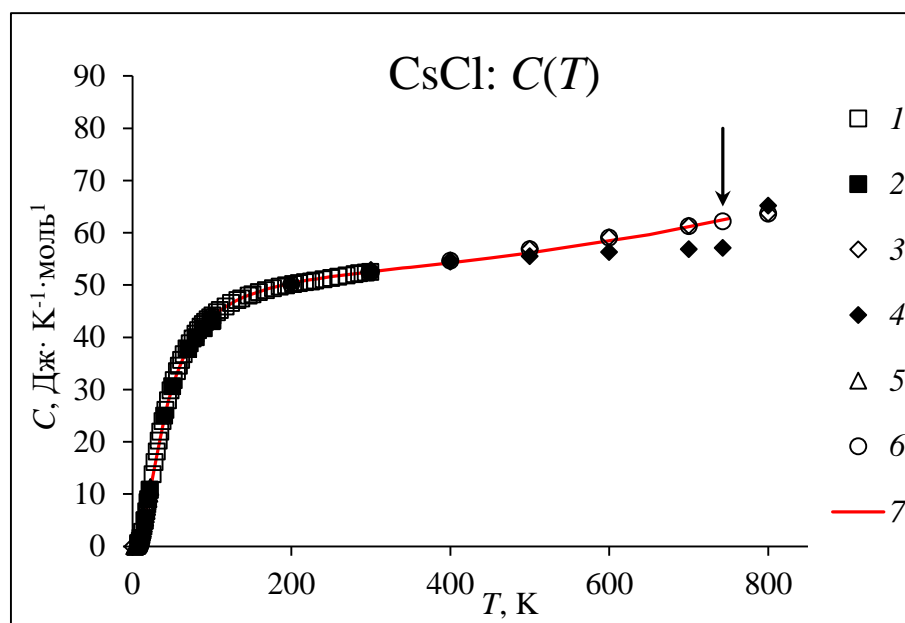
## ***2.2. Построение корреляционной модели и статистический анализ данных по теплоемкости и тепловому расширению галогенидов щелочных металлов на модельном примере CsCl***

Галогениды щелочных металлов (ГЩМ) имеют многочисленные технологические применения; они рассматриваются также как удобные модельные объекты (см. обзор [84]). Экспериментальные и теоретические исследования теплофизических и др. свойств ГЩМ, наиболее интенсивные в первой половине прошлого столетия, продолжают до сих пор. Вместе с тем, ряд важных термодинамических свойств ГЩМ изучен все еще недостаточно. В частности, как видно далее на примере CsCl, это относится и к таким базовым термодинамическим свойствам, какими являются теплоемкость  $C(T)$  и коэффициент объемного теплового расширения (КОТР)  $\alpha(T)$ .

В работе, в развитие и распространение на новый класс объектов (галогениды щелочных металлов) идей ранее опубликованных по теме работ [11-23], представлены результаты изучения корреляционной зависимости  $\alpha(C)$  твердого хлорида цезия (точка плавления  $T_m \approx 919$  К) в широкой области твердого состояния вещества, выходя далеко за известные пределы применимости низкотемпературного закона Грюнейзена. При температуре  $T_{\alpha\beta} \approx 743$  К CsCl претерпевает дополнительно полиморфное превращение от низкотемпературной ОЦК ( $\alpha$ -фаза типа CsCl) к высокотемпературной ГЦК ( $\beta$ -фаза типа NaCl) кристаллической структуре. Корреляционную зависимость  $\alpha(C)$  назовем обобщенно диаграммой Грюнейзена (Grüneisen plot, GP), а проведенный корреляционный анализ – GP-анализом. Цитируемые первоисточники, не претендуя на исчерпывающую полноту списка, дают вполне отчетливое представление о температурном поведении изученных свойств.

Температурная зависимость молярной теплоемкости хлорида цезия  $C(T)$  представлена на рис. 1. Данные работ [53–58] (см. Приложение 1) по

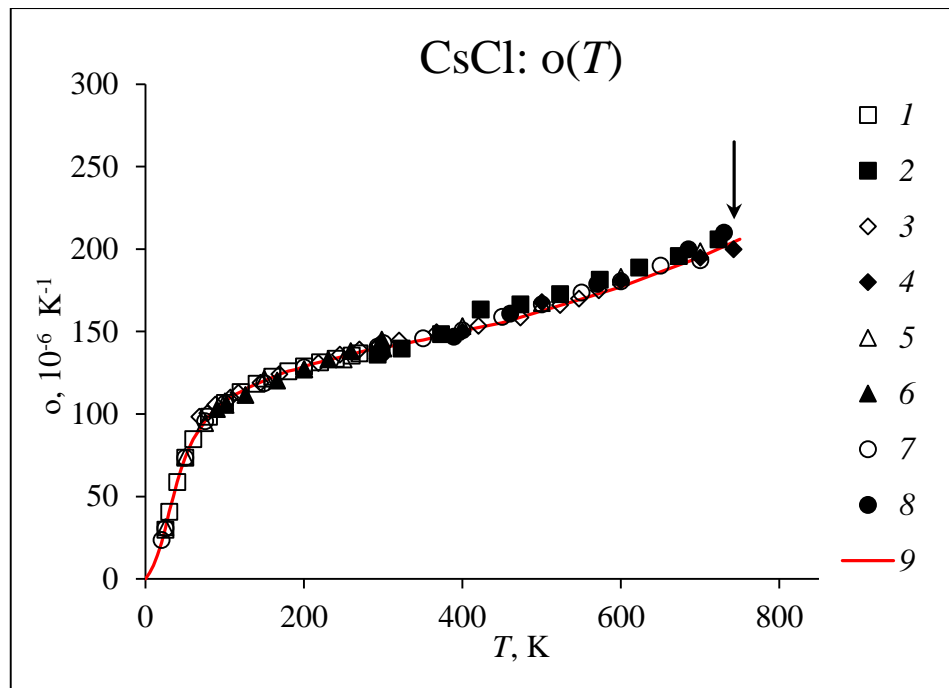
теплоемкости CsCl (всего 6 наборов данных, около 120 точек) хорошо согласуются между собой ниже 300 К. Выше 300 К необходимы дополнительные калориметрические исследования, в особенности, в окрестности точки полиморфного  $\alpha$ – $\beta$  перехода. Сплошная (трендовая) линия на рис. 1 – результат статистического усреднения и сглаживания данных  $C(T)$  разных авторов; она хорошо представляет эмпирические данные вплоть до  $T_{\alpha\beta}$ .



**Рис. 1.** Температурная зависимость теплоемкости  $C(T)$  CsCl в твердом состоянии.

Символы – эмпирические данные: 1 – [53], 2 – [54], 3 – [55], 4 – [56], 5 – [57], 6 – [58]; 7 (сплошная линия) – тренд. Стрелка маркирует  $\alpha$  –  $\beta$  переход в CsCl.

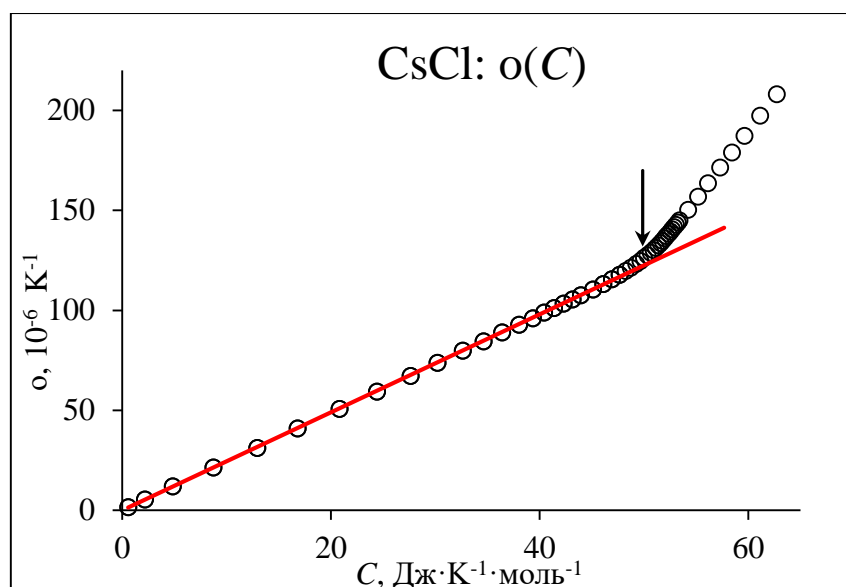
Температурная зависимость коэффициента объемного теплового расширения хлорида цезия  $\alpha(T)$  представлена на рис. 2. Данные из работ [59-66] (см. Приложение 2) по КОТР (всего 8 наборов данных, около 120 точек), в целом, находятся в разумном согласии между собой во всей области стабильности  $\alpha$ -фазы вещества; надежные данные по тепловому расширению CsCl выше  $T_{\alpha\beta}$  отсутствуют. Необходимы также дополнительные низкотемпературные дилатометрические исследования вещества.



**Рис. 2.** Температурная зависимость коэффициента объемного теплового расширения  $\alpha(T)$  CsCl в твердом состоянии. Символы – эмпирические данные: 1 – [59], 2 – [60], 3 – [61], 4 – [62], 5 – [63], 6 – [64], 7 – [65], 8 – [66], 9 (сплошная линия) – тренд. Стрелка маркирует  $\alpha - \beta$  переход в CsCl.

Точность приведенных на рис. 1, 2 сглаженных значений  $C(T)$  и  $\alpha(T)$  может быть охарактеризована визуально – по степени соответствия трендовых линий эмпирическим данным [53-66], и количественно – по величине среднеквадратического отклонения (СКО) эмпирических точек от трендовых линий  $C(T)$ ,  $\alpha(T)$  в каждой температурной точке.

GP-диаграмма – корреляционная зависимость  $\alpha(C)$ , где усредненные и сглаженные значения КОТР и молярной теплоемкости CsCl (см. Приложение 3) берутся в соответствующих температурных точках, – представлена на рис. 3.



**Рис. 3.** GP-диаграмма – корреляционная зависимость  $o(C)$  для CsCl. Символы – усредненные и сглаженные значения КОТР и молярной теплоемкости; прямая линия – линейная регрессия  $o_{lin}(C)$  для низкотемпературных значений  $o(C)$ . Стрелка маркирует классический предел  $6R$  Дюлонга и Пти для теплоемкости.

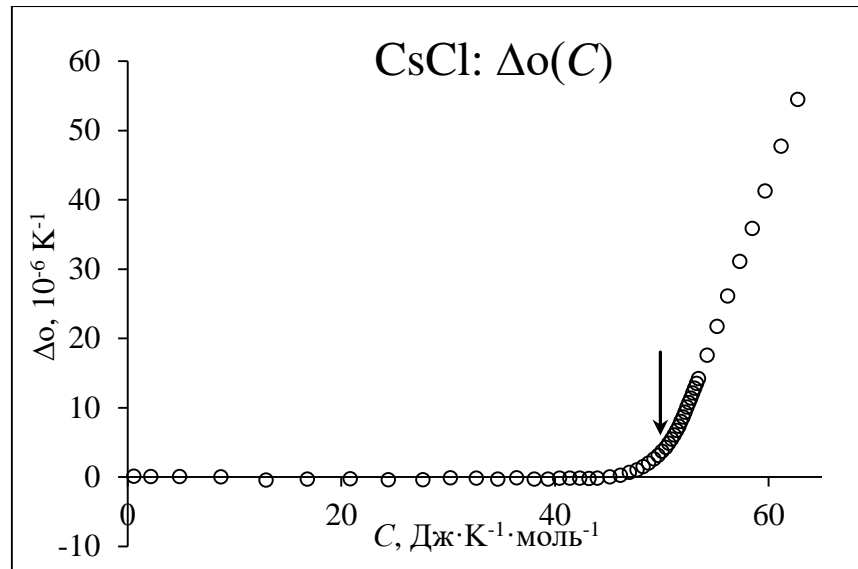
В области температур  $0 < T \leq 140$  К, для которой теплоемкость хлорида цезия  $0 < C \leq 47.68$  Дж·К<sup>-1</sup>·моль<sup>-1</sup>, а КОТР  $0 < o \leq 117.89 \times 10^{-6}$  К<sup>-1</sup>, зависимость  $o(C)$  линейна с высоким уровнем корреляции ( $R^2 = 0.9999$ ,  $n = 24$  точки)

$$o_{lin}(C) = (2.4497 \pm 0,0021) \times C, \quad (13)$$

где КОТР выражен в единицах  $10^{-6}$  К<sup>-1</sup>, а теплоемкость – в Дж·К<sup>-1</sup>·моль<sup>-1</sup>. СКО точек  $o(C)$  от регрессионной прямой (13) составляет в «линейном» диапазоне малую величину  $\sigma \approx 0.34 \times 10^{-6}$  К<sup>-1</sup>. В области достижения теплоемкостью CsCl классического предела Дюлонга и Пти  $6R \approx 49.88$  Дж·К<sup>-1</sup>·моль<sup>-1</sup> наблюдается отчетливое, близкое к излому, изменение характера зависимости  $o(C)$ : выше 250 К, т.е. при  $C > 6R$ , темп роста коэффициента теплового расширения значительно увеличивается и остается приблизительно постоянным вплоть до  $T_{\alpha\beta} \approx 743$  К. Заметим, что температура излома зависимости  $o(C)$  приблизительно соответствует температуре Дебая CsCl при этой температуре  $\theta(190 \text{ К}) \sim 180 \text{ К}$  [85].

Как хорошо видно из «разностной» GP-диаграммы (рис. 4)

$$\Delta o(C) = o(C) - o_{lin}(C), \quad (14)$$



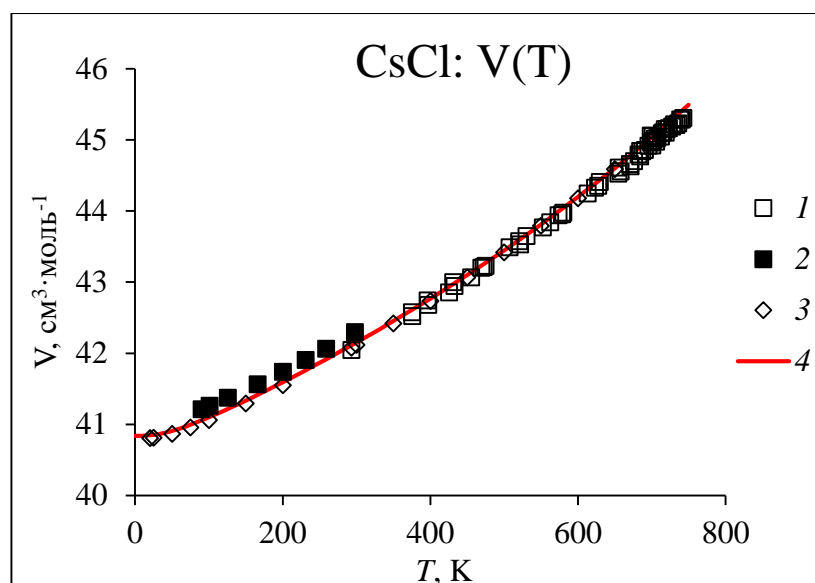
**Рис. 4.** То же, что рис. 3 для разности  $\Delta o(C) = o(C) - o_{lin}(C)$  для CsCl.

точки  $o(C)$  выше  $C = 6R$  в целом хорошо ложатся на некоторую гладкую растущую линию, близкую к прямой. Представленные на рис. 3, 4 результаты можно интерпретировать как свидетельство почти строгого постоянства ниже точки излома «дифференциального» параметра Грюнейзена:

$$\gamma' = V_0 \cdot K_0 \cdot \left( \frac{\partial o}{\partial C} \right), \quad (15)$$

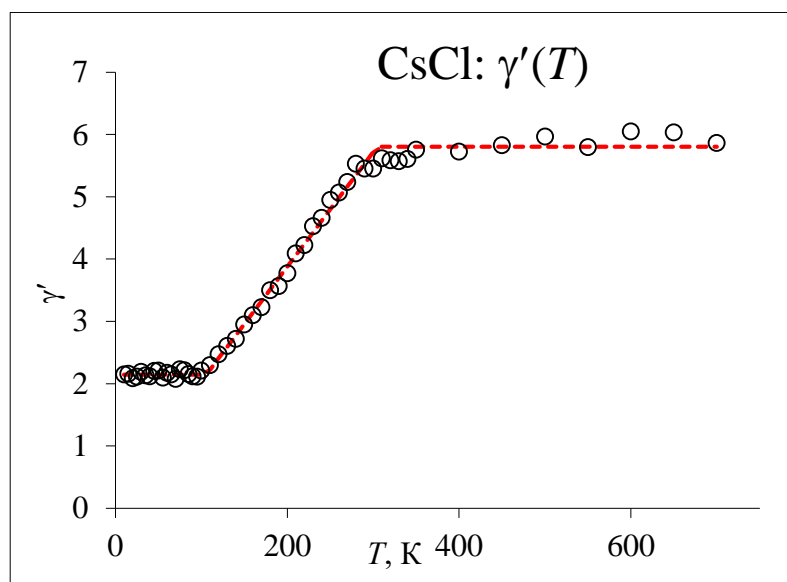
где принято:  $V_0 = 40.84 \text{ см}^3 \cdot \text{моль}^{-1}$  и  $K_0 = 21.5 \text{ ГПа}$  – низкотемпературные пределы молярного объема и модуля всестороннего сжатия CsCl. Величина  $V_0$  получена на основании измерения параметра решетки CsCl в работе [64]. Величина  $K_0 \approx K(4,2 \text{ К}) = 21.5 \text{ ГПа}$  оценена на основании значений упругих постоянных [86]. Для дополнительной проверки правильности оценки молярного объема, что было необходимо из-за повышенного разброса данных разных авторов по тепловому расширению вещества, трендовая зависимость  $o(T)$  была численно проинтегрирована и получена температурная зависимость молярного объема:

$$V(T) = V_0 \cdot \exp \left( \int_0^T o(T) dT \right) \quad (16)$$



**Рис. 5.** Температурная зависимость молярного объема  $V(T)$  CsCl в твердом состоянии: 1 – [87], 2 – [64], 3 – [65], 4 (сплошная линия) – трендовая зависимость  $V(T)$ .

Сопоставление (рис. 5) молярного объема  $V(T)$ , найденного с помощью выр. (16), с имеющимися дилатометрическими данными [64, 65, 87], пересчитанными к температурной зависимости молярного объема CsCl (в  $\alpha$ -фазе), свидетельствует о количественной адекватности установленной трендовой зависимости  $\alpha(T)$  вещества.



**Рис. 6.** Температурная зависимость дифференциального параметра Грюнейзена  $\gamma'(T)$  хлорида цезия в твердом состоянии. Пунктир – аппроксимация.



Выше  $\sim 250$  К (за пределами зоны перехода) дифференциальный параметр Грюнейзена  $\gamma'$  также близок к постоянной и притом существенно большей величине (рис. 6). Для нахождения дифференциального параметра Грюнейзена  $\gamma'$  по выр. (15) применено (без последующего сглаживания) численное дифференцирование GP-зависимости  $o(C)$  [88]. Кусочно-линейная аппроксимация описанного поведения  $\gamma'(T)$  дана на рис. 6 пунктиром. Повышенный разброс точек кривой  $\gamma'(T)$  обусловлен процедурой численного дифференцирования, обладающей, как известно, свойством усиливать погрешности исходной зависимости, особенно на концах промежутка дифференцирования.

Необычное поведение дифференциального параметра Грюнейзена  $\gamma'(T)$  хлорида цезия противоречит традиционным представлениям о поведении параметра Грюнейзена  $\gamma(T)$  в твердых телах, в т.ч. ГЦМ (см., например, [84, 86]). Отчетливо наблюдаемый излом в зависимости  $\gamma'(T)$  при  $\sim 190$  К в случае CsCl не может быть объяснен ни влиянием эффектов, обуславливающих полиморфное  $\alpha$ – $\beta$  превращение в CsCl при  $T_{\alpha\beta} \approx 743$  К, ни, тем более, вкладом термических вакансий. Следовательно, наблюдаемая выше  $\sim 190$  К особенность в поведении корреляционной зависимости  $o(C)$  дает основание для предположения о наличии и «включении» выше точки излома новых, ранее не изученных, механизмов формирования исследованных термодинамических свойств твердого хлорида цезия.

Проведенный GP-анализ на примере твердого хлорида цезия свидетельствует, вопреки традиционным воззрениям, о вероятном существенном изменении механизма формирования температурных зависимостей КОТР  $o(T)$  и/или теплоемкости  $C(T)$  вещества выше  $T \approx 190$  К  $\sim \theta(T)$ , т.е. по достижении теплоемкостью классического предела  $6R$ . Эта проблема требует целенаправленного теоретического исследования; удовлетворительной микроскопической модели для интерпретации описанных здесь фактов в настоящее время нет. Отметим при этом, что в

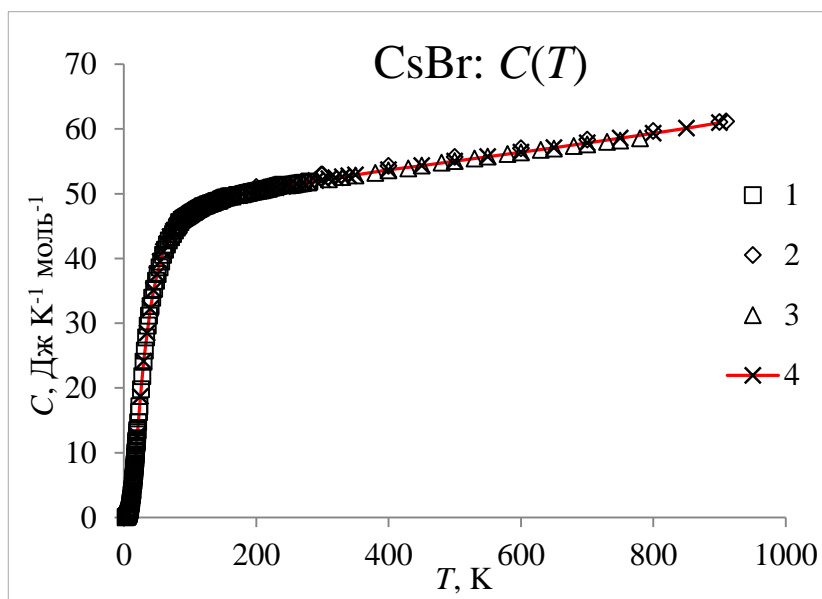
настоящей работе для построения сглаживающих трендовых линий  $C(T)$  и  $o(T)$  не использованы никакие модели этих термодинамических свойств именно с целью подчеркнуть объективный, внемоделный характер основных результатов работы.

### 2.3. Построение корреляционной модели и статистический анализ данных по теплоемкости и тепловому расширению галогенидов цезия: CsBr, CsI, CsF

В данной работе проводится статистический анализ данных для конкретных «цезидов»: CsBr, CsI, CsF по методике, подробно описанной в предшествующем параграфе.

#### Бромид цезия (CsBr)

Температурная зависимость молярной теплоемкости бромида цезия  $C(T)$  представлена на рис. 7. Данные работ [56, 67-68] по теплоемкости CsBr (всего 3 набора данных) хорошо согласуются между собой. Сплошная (трендовая) линия на рис. 7 – результат статистического усреднения и сглаживания данных  $C(T)$  разных авторов; она хорошо представляет эмпирические данные (Приложение 4).

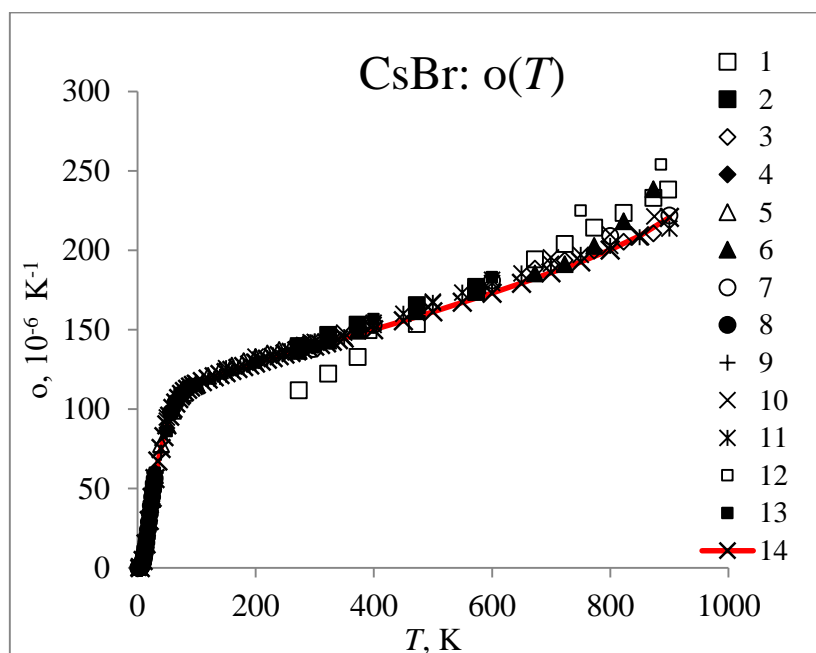


**Рис. 7.** Температурная зависимость теплоемкости  $C(T)$  CsBr в твердом состоянии.

Символы – эмпирические данные: 1 – [67], 2 – [56], 3 – [68], 4 (сплошная линия) – тренд.

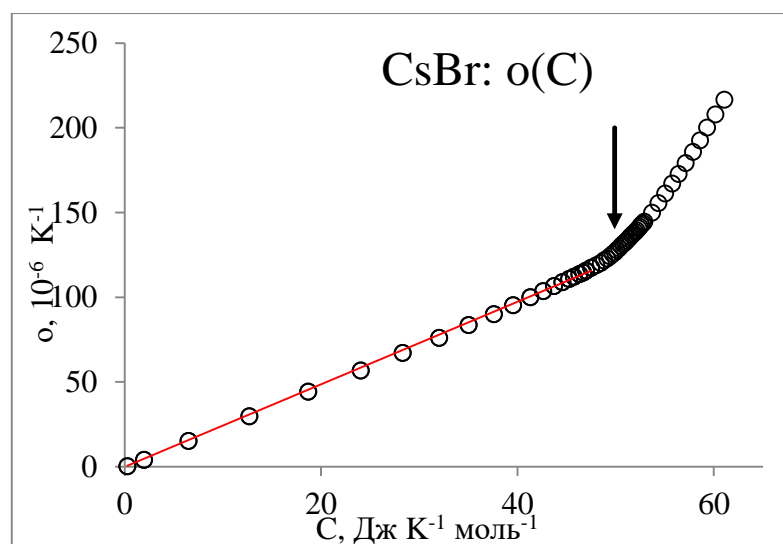
Температурная зависимость коэффициента объемного теплового расширения бромида цезия  $\alpha(T)$  представлена на рис. 8. Данные из работ [59, 62, 63, 65, 66, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76] (Приложение 5)

по КОТР (всего 13 наборов данных), в целом, находятся в разумном согласии между собой во всей области; надежные данные по тепловому расширению CsBr выше 600 К отсутствуют.



**Рис. 8.** Температурная зависимость коэффициента объемного теплового расширения  $\alpha(T)$  CsBr в твердом состоянии. Символы – эмпирические данные: 1 – [69], 2 – [70], 3 – [71], 4 – [72], 5 – [59], 6 – [73], 7 – [62], 8 – [74], 9 – [75], 10 – [63], 11 – [65], 12 – [66], 13 – [76], 14 (сплошная линия) – тренд.

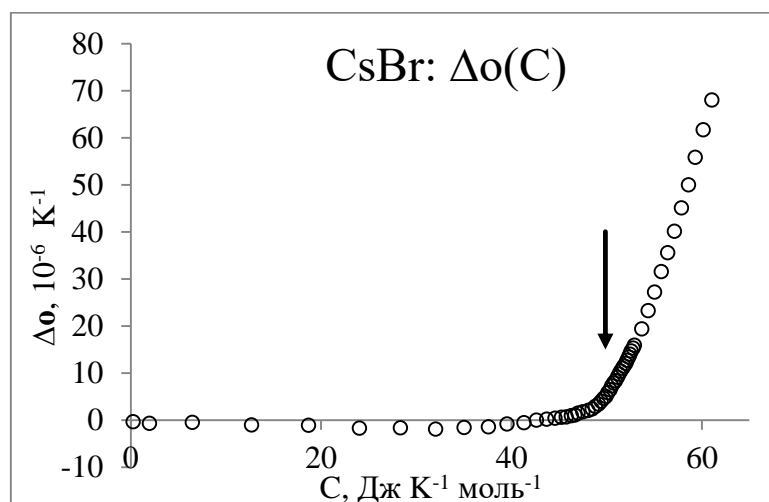
GP-диаграмма – корреляционная зависимость  $\alpha(C)$ , где усредненные и сглаженные значения КОТР и молярной теплоемкости CsBr берутся в соответствующих температурных точках, – представлена на рис. 9 (Приложение 6), зависимость  $\alpha(C)$  линейна с высоким уровнем корреляции ( $R^2 = 0.9992$ ,  $n = 21$  точка).



**Рис. 9.** GP-диаграмма – корреляционная зависимость  $o(C)$  для CsBr. Символы – усредненные и сглаженные значения КОТР и молярной теплоемкости; прямая линия – линейная регрессия  $o_{lin}(C)$  для низкотемпературных значений  $o(C)$ . Стрелка маркирует классический предел  $6R$  Дюлонга и Пти для теплоемкости.

В области достижения теплоемкостью CsBr классического предела Дюлонга и Пти  $6R \approx 49.88 \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$  наблюдается отчетливое, близкое к излому, изменение характера зависимости  $o(C)$ : выше 280 К, т.е. при  $C > 6R$ , темп роста КОТР значительно увеличивается и остается приблизительно постоянным.

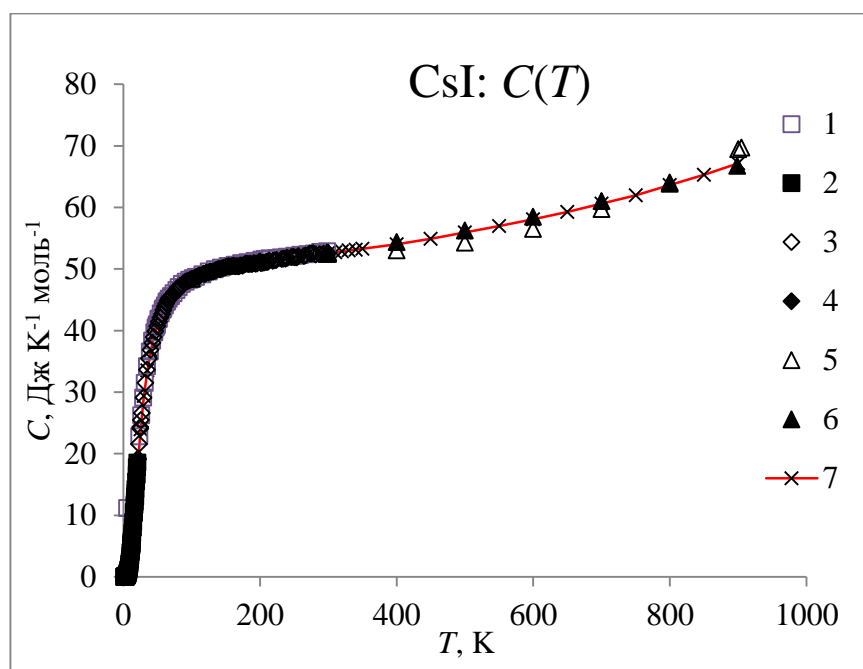
Как хорошо видно из «разностной» GP-диаграммы (рис. 10) точки  $o(C)$  выше  $C = 6R$  в целом хорошо ложатся на некоторую гладкую растущую линию, близкую к прямой.



**Рис. 10.** То же, что рис. 9 для разности  $\Delta o(C) = o(C) - o_{lin}(C)$  для CsBr.

## Иодид цезия (CsI)

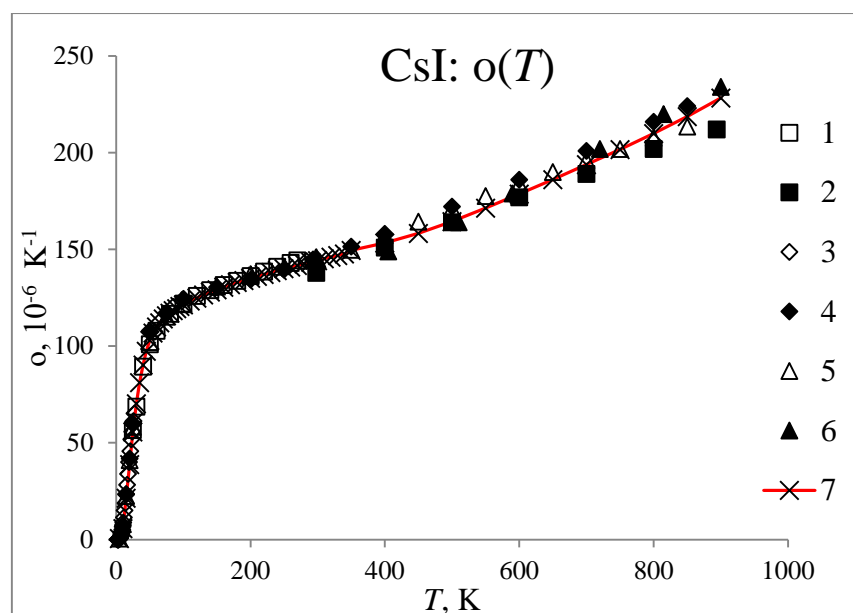
Температурная зависимость молярной теплоемкости иодида цезия  $C(T)$  представлена на рис. 11. Данные работ [53, 56, 67, 77, 78] по теплоемкости CsI (всего 6 наборов данных) хорошо согласуются между собой. Сплошная (трендовая) линия на рис. 11 – результат статистического усреднения и сглаживания данных  $C(T)$  разных авторов; она хорошо представляет эмпирические данные (Приложение 7).



**Рис. 11.** Температурная зависимость теплоемкости  $C(T)$  CsI в твердом состоянии.

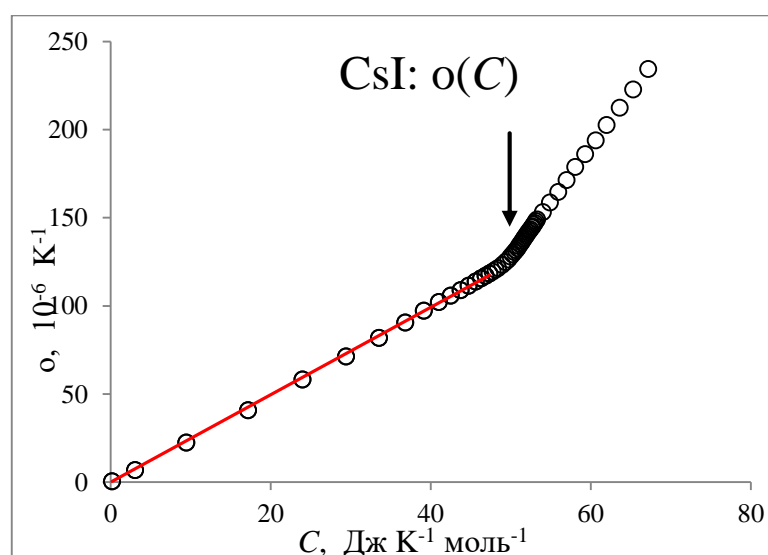
Символы – эмпирические данные: 1 – [53], 2 – [67], 3 – [67], 4 – [77], 5 – [56], 6 – [78], 7 (сплошная линия) – тренд.

Температурная зависимость коэффициента объемного теплового расширения иодида цезия  $\alpha(T)$  представлена на рис. 12. Данные из работ [59, 62, 63, 65, 66, 74] (Приложение 8) по КОТР (всего 6 наборов данных), в целом, находятся в разумном согласии между собой.



**Рис. 12.** Температурная зависимость коэффициента объемного теплового расширения  $\alpha(T)$  CsI в твердом состоянии. Символы – эмпирические данные: 1 – [59], 2 – [62], 3 – [74], 4 – [63], 5 – [65], 6 – [66], 7 (сплошная линия) – тренд.

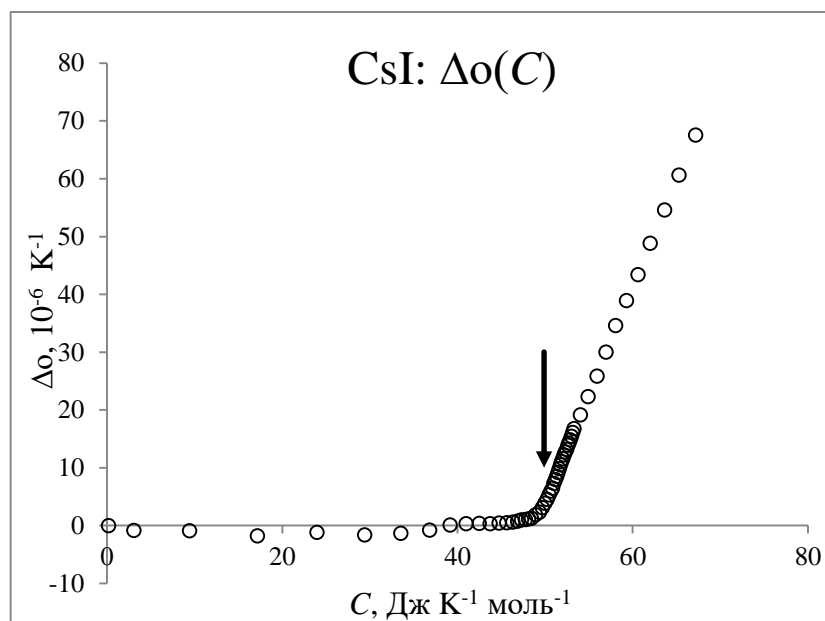
GP-диаграмма – корреляционная зависимость  $\alpha(C)$ , где усредненные и сглаженные значения КОТР и молярной теплоемкости CsI берутся в соответствующих температурных точках, – представлена на рис. 13 (Приложение 9), зависимость  $\alpha(C)$  линейна с высоким уровнем корреляции ( $R^2 = 0.9994$ ,  $n = 21$  точка).



**Рис. 13.** GP-диаграмма – корреляционная зависимость  $\alpha(C)$  для CsI. Символы – усредненные и сглаженные значения КОТР и молярной теплоемкости; прямая линия – линейная регрессия  $\alpha_{lin}(C)$  для низкотемпературных значений  $\alpha(C)$ . Стрелка маркирует классический предел  $6R$  Дюлонга и Пти для теплоемкости.

В области достижения теплоемкостью CsI классического предела Дюлонга и Пти  $6R \approx 49.88 \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$  наблюдается отчетливое, близкое к излому, изменение характера зависимости  $\sigma(C)$ : выше 200 К, т.е. при  $C > 6R$ , темп роста КОТР значительно увеличивается и остается приблизительно постоянным.

Как хорошо видно из «разностной» GP-диаграммы (рис. 14) точки  $\sigma(C)$  выше  $C = 6R$  в целом хорошо ложатся на некоторую гладкую растущую линию, близкую к прямой.

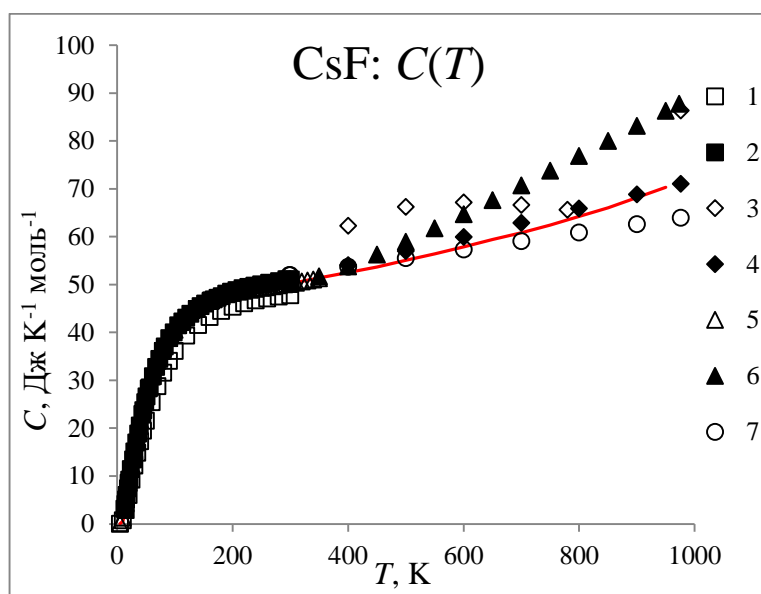


**Рис. 14.** То же, что рис. 13 для разности  $\Delta\sigma(C) = \sigma(C) - \sigma_{\text{lin}}(C)$  для CsI.



## Фторид цезия (CsF)

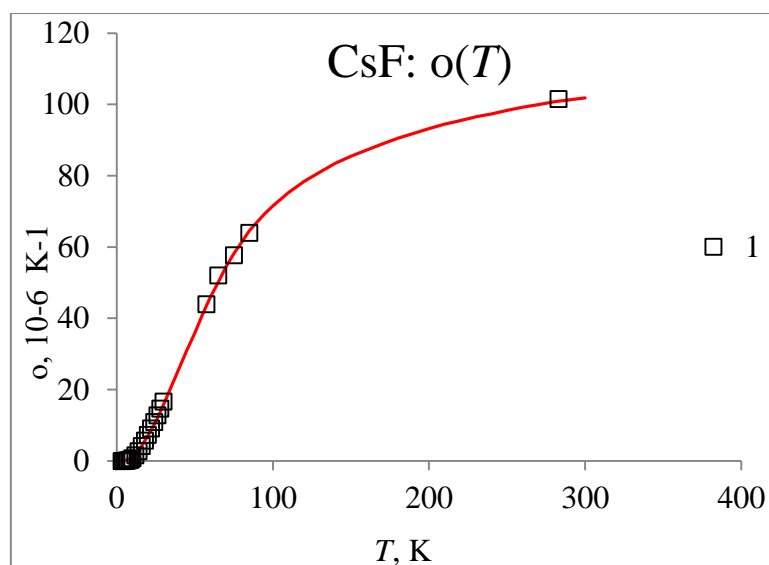
Температурная зависимость молярной теплоемкости фторида цезия  $C(T)$  представлена на рис. 15. Данные работ [56, 79, 80, 81, 82, 83] по теплоемкости CsF (всего 7 наборов данных) хорошо согласуются между собой ниже 300 К. Выше 300 К необходимы дополнительные калориметрические исследования. Сплошная (трендовая) линия на рис. 15 – результат статистического усреднения и сглаживания данных  $C(T)$  разных авторов; она хорошо представляет эмпирические данные (Приложение 10).



**Рис. 15.** Температурная зависимость теплоемкости  $C(T)$  CsF в твердом состоянии.

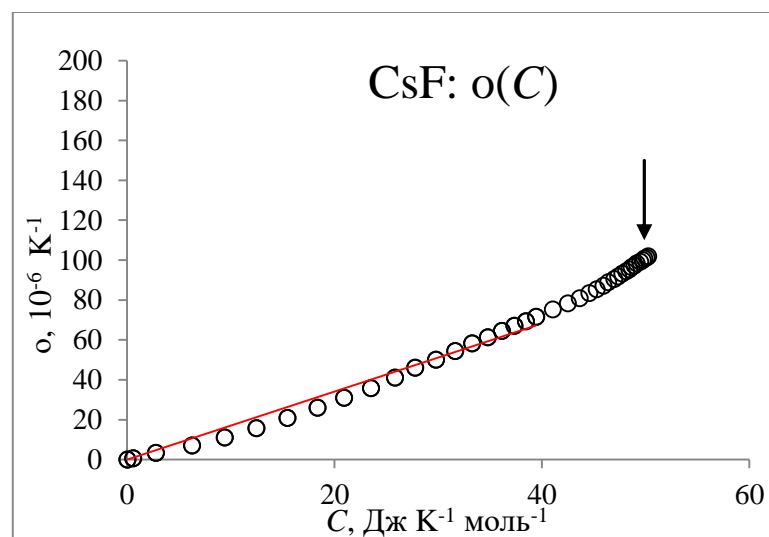
Символы – эмпирические данные: 1 – [79], 2 – [80], 3 – [81], 4 – [56], 5 – [82], 6 – [82], 7 – [83], 8 (сплошная линия) – тренд.

Температурная зависимость коэффициента объемного теплового расширения фторида цезия  $\alpha(T)$  представлена на рис. 12. Удалось найти только один набор данных [74] (Приложение 11) по КОТР. Трендовая линия проведена с учетом этих данных, что может повлечь за собой погрешность дальнейших вычислений.



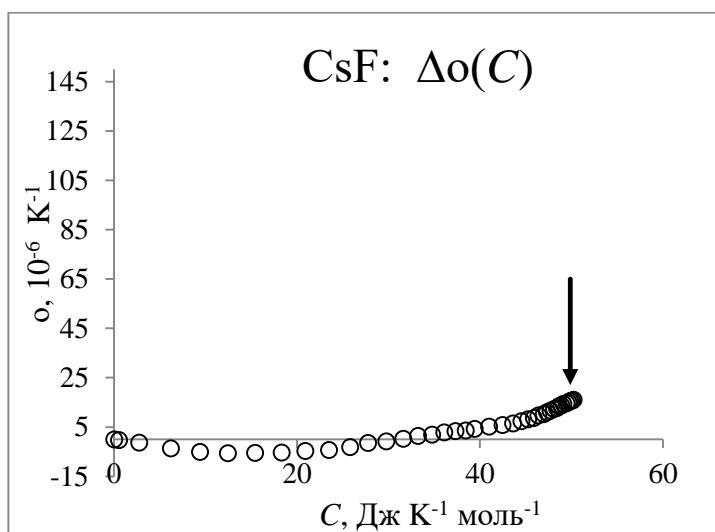
**Рис. 16.** Температурная зависимость коэффициента объемного теплового расширения  $\alpha(T)$  CsF в твердом состоянии. Символы – эмпирические данные: 1 – [74], 2 (сплошная линия) – тренд.

GP-диаграмма – корреляционная зависимость  $\alpha(C)$ , где усредненные и сглаженные значения КОТР и молярной теплоемкости CsF берутся в соответствующих температурных точках, – представлена на рис. 17 (Приложение 12), зависимость  $\alpha(C)$  линейна с уровнем корреляции ( $R^2 = 0.9799$ ,  $n = 20$  точек).



**Рис. 17.** GP-диаграмма – корреляционная зависимость  $\alpha(C)$  для CsF. Символы – усредненные и сглаженные значения КОТР и молярной теплоемкости; прямая линия – линейная регрессия  $\alpha_{lin}(C)$  для низкотемпературных значений  $\alpha(C)$ . Стрелка маркирует классический предел  $6R$  Дюлонга и Пти для теплоемкости.

В области достижения теплоемкостью CsF классического предела Дюлонга и Пти  $6R \approx 49.88 \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$  наблюдается изменение характера зависимости  $\alpha(C)$ .



**Рис. 18.** То же, что рис. 17 для разности  $\Delta\alpha(C) = \alpha(C) - \alpha_{\text{lin}}(C)$  для CsF.

Для более обстоятельного исследования данного вещества требуются дополнительные первоисточники данных по КОТР. Эта проблема требует целенаправленного теоретического исследования; удовлетворительной микроскопической модели для интерпретации описанных здесь фактов в настоящее время нет.

## ***2.4. Краткие методические рекомендации по формированию у студентов вуза профессиональных компетенций, сопряженных с поиском, обработкой, анализом и интерпретацией данных***

Для формирования у студентов устойчивых навыков собственной научно-исследовательской работы и соответствующих профессиональных компетенций, связанных с поиском, обработкой, анализом и интерпретацией данных, кафедрой высшей математики ИМИиИТ УрГПУ выбрано, в значительной степени уникальное, научное направление, связанное со статистической обработкой и корреляционным анализом данных по ключевым термодинамическим свойствам веществ. В частности, данных по теплоемкости и коэффициенту теплового расширения твердых тел, в том числе галогенидов (солей) щелочных металлов. С учетом педагогической направленности вуза, ведущей здесь является именно педагогическая компонента исследовательской деятельности, нацеленная на решение остроактуальной ныне проблемы инструментальной подготовки специалистов, способных к углубленному, содержательному и полезному анализу Больших Данных. Как показывает анализ литературы, прорывных методик подготовки таких специалистов нет, и разработка подходов к созданию методик их подготовки – дело педагогов-исследователей [24–28]. Настоящая выпускная квалификационная работа является примером того, как в условиях вуза может быть поставлен педагогический процесс подготовки специалистов-аналитиков.

С учетом специфики проводимых исследований можно работать в группах (парных бригадах). До определенной стадии члены одной бригады могут действовать независимо друг от друга. Однако, наступает «сводный» этап, когда данные каждого из членов исследовательской бригады должны быть объединены в общую таблицу, так чтобы в соответствующих температурных точках имелись обработанные данные и по теплоемкости, и по КТР для последующего корреляционного анализа.

Имеющиеся данные по теплоемкости и коэффициенту теплового расширения (КТР), даже простых, казалось бы хорошо изученных твердых тел, подчас весьма противоречивы и немногочисленны. Таким образом, возникает конкретная, фактически инженерная, задача оценки величины указанного свойства и ее достоверности для указанных условий. Для решения этой задачи необходим анализ первоисточников данных.

С учетом часто наблюдаемой противоречивости и, к тому же, малочисленности данных разных исследований возникает задача их обобщенного описания с помощью усредняющей и сглаживающей трендовой температурной зависимости.

По мере накопления достаточного количества табличных данных формируется и уточняется представление о трендовой температурной зависимости конкретного свойства (как на рис. 1, 2). Корреляционная зависимость (рис. 3) имеет характерный вид с изломом, соответствующим достижению теплоемкостью классического предела Дюлонга и Пти ( $6R \approx 49.88 \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1}$ ), выше которого, по-видимому, происходит смена механизмов формирования теплоемкости и (или) коэффициента теплового расширения. Ниже классического предела корреляция столь тесна, что позволяет предположить наличие не просто корреляционной, но функциональной связи между коррелирующими свойствами. Выше классического предела корреляция КТР и теплоемкости остается, по-видимому, линейной вплоть до точки плавления вещества. Предыдущие авторские исследования (напр., [11–23] и др.) показывают, что наблюдаемое характерное поведение корреляционной зависимости теплоемкости от КТР присуще без исключения всем уже изученным твердым веществам. Это, в свою очередь, позволяет сформулировать гипотезу о том, что такое поведение характерно для всех, или, во всяком случае, большинства твердых тел. Собственно, проверка этой гипотезы на примере различных твердых тел и составляет научное содержание педагогической работы по целенаправленному формированию исследовательских и аналитических

компетенций обучающихся. При этом, работа имеет фундаментальную научную значимость, поскольку до сих пор не установлены физические причины столь тесной и протяженной линейной корреляции до сих пор считавшихся независимыми свойств.

После завершения статистической обработки, корреляционного анализа данных и удостоверения в справедливости сформулированной гипотезы для изучаемого вещества студенты переходят к этапу подготовки рукописи для рецензируемого журнала, осваивая тем самым компетенции, связанные с подготовкой научных и научно-технических отчетов и представления результатов исследовательской деятельности. Помощь в этом студентам оказывает изучение работ других авторов, а также методических рекомендаций по подготовке научных публикаций, например, [89, 90]. Студенты имеют возможность ознакомиться с правилами оформления и представления статей к опубликованию в конкретных журналах и выполнить соответствующую подготовительную работу. Направление рукописи статьи, оформленной в соответствии с правилами журнала, каждой исследовательской бригадой в адрес редакции журнала завершает основной массовый технологический этап формирования исследовательских и аналитических компетенций обучающихся. Публикация статей и доклады на конференциях различного уровня служат внешней независимой объективной оценкой качества педагогической работы в этом направлении.

Отметим, что описанная работа технологична и легко масштабируема, так как непосредственно может быть распространена на гораздо большее число участников. Кроме того, очевидно, в работу могут быть вовлечены учащиеся с ограниченными возможностями здоровья; в этом случае просто возрастает роль удаленных (электронных) коммуникаций участников.

## Заключение

В ходе выполнения настоящей выпускной квалификационной работы получили развитие указанные во Введении и др. общепрофессиональные и профессиональные компетенции автора в области прикладной математики и информатики, как результат решения задач исследования.

Проанализирована литература, касающаяся методов и средств поиска, обработки и анализа статистических данных.

Освоены необходимые статистические инструменты обработки данных, в частности, построение эмпирических температурных зависимостей теплоемкости и КТР объектов изучения; усреднение первичных значений теплоемкости и КТР с оценкой СКО; численное интегрирование и численное дифференцирование; метод наименьших квадратов (МНК); построение сглаживающей линии тренда; корреляционный анализ.

Из множества существующих специализированных программ для статистической обработки данных, в качестве основного инструмента обработки и анализа статистических данных, выбран электронный табличный процессор MS Excel, являющийся одним из наиболее популярных и востребованных программных продуктов компании Microsoft благодаря удобству и сравнительной простоте в использовании. Выбор обоснован и тем, что для MS Excel существует множество руководств, дающих современное доступное и обстоятельное описание работы с ним.

Построение и анализ реалистичных микроскопических моделей твердого тела представляет собой весьма непростую задачу и является прерогативой профессиональных физиков – теоретиков. Вместе с тем, если модель построена, и выражение для термодинамического потенциала получено, то дальнейший термодинамический анализ вполне доступен для студентов, обучающихся по направлениям подготовки, не подразумевающим профессиональные занятия теоретической физикой, например, студентам,

обучающимся по направлению «01.03.02 – Прикладная математика и информатика», или студентам инженерных направлений подготовки.

Галогениды щелочных металлов (ГЩМ) имеют многочисленные технологические применения; они рассматриваются также как удобные модельные объекты. Экспериментальные и теоретические исследования теплофизических и др. свойств ГЩМ, наиболее интенсивные в первой половине прошлого столетия, продолжаются до сих пор. Вместе с тем, ряд важных термодинамических свойств ГЩМ изучен все еще недостаточно. В частности, это относится и к таким базовым термодинамическим свойствам, какими являются теплоемкость  $C(T)$  и объемный коэффициент теплового расширения (ОКТР)  $\alpha(T)$ .

Галогениды щелочных металлов, в частности, галогениды цезия («цезиды») имеют большой потенциал необходимости использования в самых разных областях: оптика, медицина, промышленность.

Поиск необходимой первичной информации осуществлялся в Сети с помощью информационно-поисковых систем, главным образом, Google. Из имеющихся первоисточников данных была составлена единая таблица, отсортировав данные по температуре в которой, был получен спектр значений, соответствующий каждому термодинамическому свойству. Корреляцию этих свойств можно изучать лишь при условии совпадения табличных температурных точек для  $C(T)$  и  $\alpha(T)$ . Имеющиеся данные фиксировались в MS Excel, для наглядности нанесены на диаграммы. Информация о самих оригинальных работах, их аннотации хранились в MS Word. По мере накопления достаточного количества табличных данных формировалось и уточнялось представление о трендовой температурной зависимости конкретного свойства. Оценить трендовую зависимость можно визуально, по степени соответствия эмпирическим данным.

Гипотеза работы на примере «цезидов» подтверждена: между изученными термодинамическими свойствами (теплоемкость, КТР) каждого



представителя семейства, прослеживается вполне четкая линейная, точнее, «би-линейная» связь с изломом вверх, соответствующим достижению теплоемкостью классического предела Дюлонга и Пти.

Для решения проблемы формирования устойчивых навыков научно-исследовательской и аналитической работы у студентов и соответствующих профессиональных компетенций, связанных с поиском, обработкой, анализом и интерпретацией данных, выбрано в значительной мере уникальное, научное направление, связанное со статистической обработкой и корреляционным анализом данных по ключевым термодинамическим свойствам твердых тел. Систематическое формирование этих компетенций в рамках реалий существующего в ИМИиИТ УрГПУ учебного процесса является непростой, но решаемой задачей, о чем свидетельствуют сформулированные и апробированные методические рекомендации.

Таким образом, при подготовке настоящей ВКР поставленные задачи решены, цель, состоящая в завершении учебной работы по развитию профессионально значимых компетенций автора, достигнута.

## Библиографический список

1. К. Селезнев. Проблемы анализа Больших Данных // Открытые системы. 2012. № 7. URL: <http://www.osp.ru/os/2012/07/13017638/>
2. Исаев Е. А., Корнилов В. В. Проблема обработки и хранения больших объемов научных данных и подходы к ее решению // Математическая биология и биоинформатика. 2013. Т. 8. № 1. С. 49-65.
3. Джейсон Хайнер. Самая большая проблема больших данных – их слишком трудно загружать // PC Week/RE №7 (906) 19 апреля 2016. URL: <http://www.pcweek.ru/idea/article/detail.php?ID=184747>
4. Коровин А.С., Скирневский И.П. Система динамической визуализации больших массивов данных сложных физических экспериментов // Информационные технологии. 2016. Т. 22. № 5. С. 373–378.
5. Grounsell D. Why the marketing industry is failing to attract the best and brightest talent // Campaign US. May 10, 2016. URL: <http://www.campaignlive.com/article/why-marketing-industry-failing-attract-best-brightest-talent-1394304>
6. MacKay D. J. C. Information Theory, Inference and Learning Algorithms. Cambridge (UK): Cambridge University Press, 2003. – 628 p.
7. Hastie T., Tibshirani R., Friedman J. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. 2<sup>nd</sup> Edition. Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. – 763 p.
8. Галашев В.А. Системы поиска и обработки информации: Учеб. - метод. пособие. Ижевск: Удм. гос. ун-т., 2011. – 149 с.
9. Peng R.D. and Matsui E. The Art of Data Science. A Guide for Anyone Who Works with Data. Skybrude Consulting, LLC, 2015. – 162 p. URL: <https://leanpub.com/artofdatascience>
10. ФГОС ВО по направлению подготовки «010302 – Прикладная математика и информатика» (квалификация (степень) бакалавр). Утв. Приказом МОН РФ от 20.05.2015 №538.

11. Бодряков В.Ю., Быков А.А. Особенность корреляционной зависимости объемного коэффициента теплового расширения алюминия от его теплоемкости // Электронное научное издание «Актуальные инновационные исследования: наука и практика». 2014. № 1. 9 с.
12. Бодряков В. Ю., Быков А. А. Особенность корреляционной зависимости объемного коэффициента теплового расширения свинца от его теплоемкости // Электронное научное издание «Актуальные инновационные исследования: наука и практика». 2014. №2. 9 с.
13. В. Ю. Бодряков. О корреляции температурных зависимостей теплового расширения и теплоемкости вплоть до точки плавления тугоплавкого металла: молибден // Теплофизика высоких температур. 2014. Т.52. № 6. С.863–869.
14. Бодряков В.Ю. О корреляции коэффициента теплового расширения и теплоемкости кристалла аргона // ФТТ. 2014. Т.56. Вып.11. С. 2279–2285.
15. V. Yu. Bodryakov. On Correlation between Heat Capacity and Thermal Expansivity of Cubic Pt-Metals (Following to the John Arblaster's Evaluations) // Open Sci. J. Mod. Phys. 2015. V. 2. N. 1. P. 10-13.
16. Бодряков В.Ю., Быков А.А. Корреляционные характеристики температурного коэффициента объемного расширения и теплоемкости корунда // Стекло и Керамика. 2015. №2. С.30-33.
17. В.Ю. Бодряков. О корреляции коэффициента теплового расширения и теплоемкости кристалла инертного газа ксенона // Неорган. Матер. 2015. Т.51. №2. С.213-217.
18. Бодряков В.Ю. О корреляции температурных зависимостей теплового расширения и теплоемкости вплоть до точки плавления тугоплавкого металла: Вольфрам // ТВТ. 2015. Т. 53. № 5. С. 676–682.
19. Бодряков В.Ю. Корреляция коэффициента теплового расширения и теплоемкости кристалла инертного газа: криптон // ЖТФ. 2015. Т. 85. Вып. 3. С. 65–68.

20. Bodryakov V. Yu. Specific Heat and Thermal Expansion of Refractory Nonmetal: CaO // Open Sci. J. Mod. Phys. 2015. V. 2. N. 4. P. 50–54.
21. Bodryakov V. Yu. Thermodynamic Properties of Tantalum through the Whole Range of Solid State: Correlation Analysis and Self-Consistent Interpretation. Chapter 2 in the Book: R.M. Sultanov, U.M. Dzhemilev, V.Yu. Bodryakov, B.A. Greenberg, M.A. Ivanov, A.M. Patselov, A.V. Inozemtsev, M.S. Pushkin, S.V. Kuzmin, V.I. Lysak. “Tantalum: Geochemistry, Production and Potential Applications” / Ed. Harry Reyes. Hauppauge (NY, USA): Nova Science Publishers, Inc., 2015. – 189 p.
22. Bodryakov V.Yu. Elastic Moduli and Related Thermodynamic Properties of Cryocrystalline Argon // Open Science Journal of Modern Physics. 2015. V. 2. Issue 6. P. 111-121.
23. В.Ю. Бодряков, Е.В. Карпова. Применение корреляционного анализа для взаимосогласованной оценки коэффициента теплового расширения и теплоемкости огнеупорной керамики: MgO // Огнеупоры и Техническая Керамика. 2015. №10. С. 18–21.
24. Бодряков В.Ю., Ушакова Л.Р., Башкатов А.Н. Развитие исследовательских компетенций студентов как инструмент формирования высоких профессиональных качеств современного инженера / Материалы МНПК «Формирование инженерного мышления в процессе обучения», 7-8 апреля 2015 г., Екатеринбург: УрГПУ, 2015. [284 с.], С. 33–37.
25. Башкатов А.Н., Бодряков В.Ю., Ушакова Л.Р. Формирование устойчивых самообразовательных и исследовательских компетенций у студентов вуза как «спусковой» механизм готовности выпускников к обучению в течение всей жизни / Материалы МНПК «Обучение в течение всей жизни: «Life Long Learning: дополнительное образование как фактор личностного и профессионального развития»». Вып. 8. Екатеринбург: УрФУ, 9 – 10 апреля 2015 г., С. 33–42. [Сб. Трудов конференции. Вып. 8. Екатеринбург: ООО «ИПП» Макс-Инфо, 2015. – 301 с.]

26. В. Ю. Бодряков, Л. Р. Ушакова. Практический опыт формирования исследовательских компетенций студентов, обучающихся по направлению «01.03.02 – прикладная математика и информатика». С. 31–40. В сб.: «Запад, Восток и Россия: История и историк в ситуации интердисциплинарности: Вопросы всеобщей истории»: Сборник научных и учеб. - метод. трудов (Ежегодник). Вып. 17 / Под ред. проф. В. Н. Земцова. – Екатеринбург: УрГПУ, 2015. Часть I. – 224 с.
27. Бодряков В.Ю., Ушакова Л.Р. Практический опыт формирования исследовательских компетенций студентов, обучающихся по направлению «01.03.02 – Прикладная математика и информатика» // Педагогическое образование в России. 2015. №7. С.172–181.
28. Ушакова Л. Р., Бодряков В. Ю. ИКТ как эффективный инструмент формирования и развития профессионально значимых компетенций студентов – прикладников в области поиска, анализа и интерпретации статистической информации. С. 110–116. В межвузовском сб. научных работ «Актуальные вопросы преподавания математики, информатики и информационных технологий». Екатеринбург: УрГПУ, 2016. – 294 с.
29. Гмурман В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика: учеб. пособие для студентов вузов / В. Е. Гмурман. – 12-е изд., перераб. – М.: Высш. образование, 2006. – 479 с.
30. Статистика: учеб. для студентов вузов по спец. "Статистика" / Под. ред. И. И. Елисеевой. М.: ТК Велби: Проспект, 2008. – 448 с.
31. Орлов А. И. Прикладная статистика [Электронный ресурс] / Орлов А. И. – Москва: Интернет-Университет Информационных Технологий, 2009. – 846 с. URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=234537>
32. Кузнецов И.Н. Информация: сбор, защита, анализ: Учебник по информационно-аналитической работе / И.Н. Кузнецов. – М.: ООО Изд. Яуза, 2001. – 93 с.
33. Завгородний В. И. Комплексная защита информации в компьютерных системах. М.: Логос, 2001. – 264 с.

34. Левин М. Д. Методы поиска информации в Интернет. М.: Солон-Пресс, 2003. – 224 с.
35. Рыжов В. А., Корниенко А. В., Рыжов Р. В. Управление знаниями: работа с информацией - от источников, поиска, сбора и анализа к представлению знаний: Учебный курс [Электронный ресурс]. URL: [http://vladimir.socio.msu.ru/1\\_KM/index.htm](http://vladimir.socio.msu.ru/1_KM/index.htm)
36. Гусев В. С. Google: Эффективный поиск. Краткое руководство. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2006. – 240 с.
37. URL: <https://products.office.com/>
38. Васильев А. Н. Числовые расчеты в Excel: Учебное пособие. СПб.: Лань, 2014. – 608 с.
39. Пошаговые руководства с использованием Excel. URL: <https://msdn.microsoft.com/ru-ru/library/d7f63219.aspx>
40. MS Excel – руководство пользователя. URL: <http://excel2010.ru/>
41. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том V. Статистическая физика. Часть I. 5-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 616 с.
42. Кириллин В. А., Сычев В. В., Шейндлин А. Е. Техническая термодинамика [Электронный образовательный ресурс]. М.: Издательство МЭИ, 2008.
43. Anderson D. L. Theory of the Earth. Boston: Blackwell Scientific Publications, 1989. URL: <http://resolver.caltech.edu/CaltechBOOK:1989.001>
44. Kondepudi D., Prigogine I. Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures. 2<sup>nd</sup> Edition. John Wiley & Sons, 2015. – 524 p.
45. Термодинамические свойства индивидуальных веществ, под ред. В. П. Глушко, 3 изд., т. 1-4, М., 1978-82.
46. Kroupa A. Modelling of phase diagrams and thermodynamic properties using Calphad method – Development of thermodynamic databases // Computational Materials Science. 2013. V. 66. N. 1. P. 3–13.
47. Soustelle M. Thermodynamic Modeling of Solid Phases. Wiley-ISTE. 2015. – 264 p.

48. Scott Shell M. Thermodynamics and Statistical Mechanics. An Integrated Approach. Cambridge: Cambridge University Press, 2015. – 500 p.
49. Thermal Expansion of Solids. CINDAS Data Series on Material Properties. V. I-4 / Ed. By C.Y. Ho. Materials Park (OH): ASM International. 1998. – 293 p.
50. Barron T.H.K., White G.K. Heat Capacity and Thermal Expansion at Low Temperatures. Springer Science & Business Media, 2012 г. – 338 p.
51. URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki>
52. URL: <http://moscow.pink/>
53. A. R. Taylor Jr., T. E. Gardner, and D. F. Smith. Thermodynamic Properties of Cesium Chloride and Cesium Iodide from 0° to 300°K // U. S. Bureau of Mines Report N. RI-6157. 1963. – 7 p.
54. L. M. Tiwari and B. Sharan. Phonon Spectrum and Specific Heat of Caesium Chloride // Phys. Status Solidi, 1965. V. 8. I. 1. P. 265–269.
55. D.R. Stull, H. Prophet. JANAF Thermochemical Tables. Nat. Stand. Ref. Data Ser. NIST. 1971. V.37. p. 527.
56. Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание. В 4-х томах. Том IV. М.: Наука, 1981. Книга 1 – 623 с.; Книга 2 – 560 с.
57. J. C. Ho and D. P. Dandekar. Low-temperature heat capacities of RbCl, RbBr, and CsCl // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N. 4. p. 2117–2119.
58. URL: <http://kinetics.nist.gov/janaf/html/Cl-007.html>
59. A. C. Bailey, B. Yates. The Low Temperature Thermal Expansion and Related Thermodynamic Properties of Alkali Halides with a Caesium Chloride Structure // Philosophical Magazine. 1967. V. 16. I. 144. P. 1241-1248.
60. H. T. Fullam. The Effect of KCl and NaCl Additions on Certain Physical Properties of CsCl // Mat. Res. Bull. 1972. V. 7. I. 4. P. 289-300.
61. Rapp, J. E. Merchant, H. D. Thermal Expansion of Alkali Halides from 70 to 570 K // Journal of Applied Physics. 1973. V. 44. N. 9. P. 3919-3923.
62. K.K. Srivastava, H.D. Merchant. Thermal expansion of alkali halides above 300°K // J. Phys. Chem. Solids. 1973. V. 34. I. 12. P. 2069–2073.

63. Touloukian Y.S., Kirby R.K., Taylor R.E., Lee T.Y.R. Thermophysical Properties of Matter – The TPRC Data Series. V. 13. Thermal expansion – Nonmetallic Solids. NY–Washington: IFI/Plenum. 1977. 1800 p.
64. V. Ganesan, K. S. Girirajan. Lattice Parameter and Thermal Expansion of CsCl and CsBr by X-Ray Powder Diffraction. I. Thermal Expansion of CsCl From Room Temperature to 90° K // *Pramana*. 1986.V. 27. N. 3. P.469-474.
65. K. Wang , R. R. Reeber. Thermal Expansion of Caesium Halides with the CsCl Structure// *J. Appl. Cryst.* 1995. V. 28. P. 306-313.
66. S. P. Upadhyay and M. Kumar. Thermal Expansion and Compression of Alkaline Earth Oxides and Cesium Halides at High Temperature and High Pressure // *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1995. V. 191. I. 2. P. 299–305.
67. M. Sorai, Hiroshi Suga and Syuzo Seki. Thermal Properties of Alkali Halide Crystals with the CsCl-type Structure. I.Construction of a Calorimeter for the Temperature Region 1-20°K and Heat Capacities of Caesium Bromide and Caesium Iodide between 1.5 and 300°K \\ *Bulletin of the Chemical Society of Japan*. 1967. V. 41. N.2. P. 312-321.
68. Rajiv Kohli. Heat capacity and thermodynamic properties of alkali metal compounds. Part 8. Cesium and rubidium halides // *Thermochimica Acta*. 1994. V. 237. I. 2. P. 247–252.
69. Johnson J W, Agron P A and Bredig M A. Molar Volume and Structure of Solid and Molten Cesium Halides // *J. Am. Chem. Soc.* 1955. V. 77. N.10. P. 2734-2737.
70. Krishnan, R. S. & Srinivasan, R.. Thermal Expansion of Caesium Bromide // *Proc. Phys.Soc.* 1956. B. V. 69. N. 6. P. 679-682.
71. Pathak P. D., Pandya, N. V. Thermal Expansion of some Alkali Halides by X-ray Diffraction// *Indian J. Phys.* 1960 V. 34. P. 416-423.
72. G. K. White. The Thermal Expansion of Alkali Halides at Low Temperature // *the Royal Soc.* 1965. V. 286. N. 1405. P. 204-217.



73. P. D. Pathak and N.G.Vasavada. Thermal Expansion of NaCl, KCl and CsBr by X-ray Diffraction and the Law of Corresponding States//Acta Cryst. 1970. A26. P. 655-658.
74. G. K. White and J. G. Collins The Thermal Expansion of Alkali Halides at Low Temperatures // Proc. R. Soc. Lond. F. 1973. V.333. N.1593. P. 237-259.
75. Новицкий Л.А., Кожевников И.Г. Теплофизические свойства материалов при низких температурах. Справ. изд., М.: Машиностроение. 1975. – 216 с.
76. Из справочника: Физические величины. Справ. Изд. Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. – М.: Энергоатомиздат, 1991, 1232 С. English: Grigoriev I.S. and Meilikhov E.Z. 1997. Handbook of Physical Quantities (New York: CRC Press).
77. B. J. Marshall and J. R. Kunkel. Heat Capacity and Elastic Constants of CsI at Low Temperatures// Journal of Applied Physics. 1969. V. 40 N. 13. p. 5191.
78. Yoichi Takahashi, Yuji Kohsaka. Heat Capacity and Enthalpy of Cesium Iodide from 300 to 830 K // Journal of Nuclear Materials. 1985. V.130. p. 109-114.
79. Arnold M. Karo. Lattice Vibrations in Alkali Halide Crystals. II. Potassium and Rubidium Halides; Cesium Fluoride\\ The Journal of Chemical Physics. 1960. V. 33. I. 1. P. 7.
80. И.Е. Пауков, Ф.С. Рахменкулов. Теплоемкость при низких температурах, абсолютная энтропия и энтальпия при стандартных условиях CsF. // Журн. Физ. Хим, 1969. 43. с. 788
81. Alexander.C. Macleod. High-temperature Thermodynamic Properties of the Alkali-metal Fluorides\\ J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1. 1973. V. 69. P. 2026-2035.
82. O. Beneš , R.J.M. Konings , D. Sedmidubský , M. Beilmann , O.S. Valu , E. Capelli , M. Salanne, S. Nichenko . A comprehensive study of the heat capacity of CsF from  $T = 5$  K to  $T = 1400$  K // J. Chem. Thermodynamics. 2013. V 57. P. 92–100.
83. URL: <http://kinetics.nist.gov/janaf/html/Cs-008.html>.

84. D.B. Sirdeshmukh, L. Sirdeshmukh, K.G. Subhadra. Alkali Halides: A Handbook of Physical Properties. Springer. 2001. – .286 p.
85. S.K. Shukla, K.K. Mishra, A.N. Pandey, G.K.Upadhyay and K.S.Upadhyaya. IOSR J. Appl. Phys. (IOSR-JAP) 2012. V. 2. N. 4. P. 26.
86. В.А. Кучин, В.Л. Ульянов. Упругие и неупругие свойства кристаллов. М.: Энергоатомиздат. 1986. 136 с.
87. J.W. Menary, A.R. Ubbelohde and I. Woodward. Proc. Roy. Soc. Lond. A, 1951. V. 208. N. 1093. P. 158.
88. Г. Корн, Т. Корн Справочник по математике для научных работников и инженеров. Определения, теоремы, формулы. М.: Наука. 1970. 720 с.
89. Авдеева Н., Лобанова Г., Сусь И. Культура подготовки и представления научных работ // Качество Образования. 2014. № 7-8. С. 52–56.
90. Экспертно-аналитический Центр РАН. Стандарты выполнения научно-исследовательской работы (НИР). URL: <http://eac-ras.ru/NIR>. Дата обращения: 02.07.2015.

## Первичные данные по теплоемкости CsCl.

1. A. R. Taylor, Jr., T. E. Gardner, and D. F. Smith. Thermodynamic Properties of Cesium Chloride and Cesium Iodide from 0° to 300°K // U. S. Bureau of Mines Report N. RI-6157. 1963. 7 p. [53]

<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
7,19	0,435	61,29	35,659	146,38	48,018
9,29	1,105	64,75	36,806	150,96	48,253
12,24	2,776	68,36	37,874	159,21	48,659
15,24	5,016	72,14	38,900	168,07	49,053
17,31	6,695	75,78	39,783	176,79	49,404
19,18	8,474	79,28	40,687	185,38	49,706
21,99	10,894	82,68	41,412	193,61	49,965
25,36	13,829	85,98	42,073	202,22	50,183
28,05	16,132	88,79	42,571	209,43	50,380
30,55	18,179	91,69	43,007	217,04	50,597
32,96	20,231	94,8	43,442	224,81	50,723
35,28	21,939	97,85	43,857	230,22	50,849
38,18	24,003	100,85	44,229	240,63	51,138
41,43	26,117	106,47	44,820	250,42	51,355
44,64	27,976	110,08	45,217	259,26	51,586
48,1	29,881	117,13	45,908	269,44	51,854
51,96	31,820	124,32	46,574	279,54	52,121
55,95	33,540	132,32	47,164	285,39	52,268
58,47	34,566	137,05	47,470	293,64	52,389

2. L. M. Tiwari and B. Sharan. Phonon Spectrum and Specific Heat of Caesium Chloride // Phys. Status Solidi. 1965. V. 8. I 1. P. 265–269. [54]

<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
7,19	0,645	50	30,635
10	1,654	70	37,761
15,24	5,016	80	40,055
20	9,031	90	41,768
21,99	10,819	100	43,116
40	25,054	100,85	43,220

3. D.R. Stull, H. Prophet. JANAF Thermochemical Tables. Nat. Stand. Ref. Data Ser. NIST. 1971.V.37. p. 527. [55]

<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
100	44,12	500	56,94
200	50,16	600	59,14
298	52,48	700	61,34
300	52,93	800	63,72
400	54,72	900	64,22

4. Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание. В 4-х томах. Том IV. М.: Наука, 1981. Книга 1 – 623 с.; Книга 2 – 560 с. [56]

<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
100	44,1	600	56,303
200	50,12	700	56,897
298,15	52,47	743	57,124
300	52,522	800	65,2
400	54,463	900	65,2
500	55,551	919	73,5

5. J. C. Ho and D. P. Dandekar. Low-temperature heat capacities of RbCl, RbBr, and CsCl // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N. 4. P. 2117–2119. [57]

<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
2,59	0,013	5,17	0,117	10,93	1,829
2,75	0,015	5,37	0,133	11,40	2,090
2,88	0,017	5,54	0,150	11,88	2,386
2,99	0,020	5,77	0,174	12,39	2,717
3,16	0,023	6,01	0,203	12,96	3,098
3,26	0,026	6,26	0,237	13,42	3,417
3,42	0,030	6,58	0,285	14,05	3,887
3,55	0,033	6,91	0,344	14,63	4,320
3,73	0,039	7,28	0,420	15,32	4,854
4,09	0,052	7,62	0,499	16,09	5,497
3,94	0,046	8,01	0,604	16,90	6,150
4,19	0,057	8,53	0,760	17,68	6,838
4,29	0,061	8,86	0,896	18,52	7,547
4,49	0,072	9,45	1,115	19,25	8,104

4,65	0,081	9,87	1,295	20,35	9,090
4,83	0,092	10,23	1,462	21,48	10,108
5,00	0,104	10,54	1,619	22,82	11,362

6. [URL: http://kinetics.nist.gov/janaf/html/CI-007.html](http://kinetics.nist.gov/janaf/html/CI-007.html) [58]

<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
100	44,091	600	59,099
200	50,128	700	61,296
298,15	52,442	743	62,237
300	52,472	800	63,68
400	54,685	918	64,266
500	56,902		

Первичные данные по коэффициенту теплового расширения CsCl.

1. A. C. Bailey & B. Yates. The Low Temperature Thermal Expansion and Related Thermodynamic Properties of Alkali Halides with a Caesium Chloride Structure // Philosophical Magazine. 1967. V. 16. I. 144. P. 1241-1248. [59]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
25	30	140	118,5
30	40,8	160	122,7
40	58,8	180	126
50	73,5	200	129
60	84,9	220	131,4
80	98,4	240	133,5
100	106,8	260	135,6
120	113,4	270	136,8

2. H. T. Fullam. The Effect of KCl and NaCl Additions on Certain Physical Properties of CsCl // Mat. Res. Bull. 1972. V. 7. I. 4. P. 289-300. [60]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
293	136,2	523	172,8
323	139,8	573	181,5
373	148,5	623	189
423	163,5	673	195,9
473	166,5	723	206,1

3. Rapp, J. E. Merchant, H. D. Thermal Expansion of Alkali Halides from 70 to 570 K // Journal of Applied Physics. 1973. V. 44. N. 9. P. 3919-3923. [61]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
68	98,4	218	131,1	420	153,6
78	100,5	245	136,2	473	158,7
88	105,9	270	139,2	523	166,2
107	110,1	293	141,3	547	170,1
117	113,1	295	142,2	572	175,2
145	119,1	320	144,6		
169	124,2	367	149,7		

4. K.K. Srivastava, H.D. Merchant. Thermal expansion of alkali halides above 300°K // J. Phys. Chem. Solids 1973. V. 34. I. 12. P. 2069–2073. [62]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
298	139
400	150
500	168
600	181
700	195
742	200

5. Из справочника: Touloukian Y.S., Kirby R.K., Taylor R.E., Lee T.Y.R. Thermophysical Properties of Matter – The TPRC Data Series. V. 13. Thermal expansion – Nonmetallic Solids. NY–Washington: IFI/Plenum. 1977. 1800 p. [63]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
25	31,5	293	138,6
50	74,1	300	139,8
75	94,5	400	153,3
100	107,7	500	167,4
150	121,5	600	183,3
200	127,2	700	198,9
250	133,2		

6. V. Ganesan, K. S. Girirajan. Lattice Parameter and Thermal Expansion of CsCl and CsBr by X-Ray Powder Diffraction. I. Thermal Expansion of CsCl From Room Temperature to 90° K // Pramana. 1986.V. 27. N. 3. P.469-474. [64]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
90	103,2
101	105,6
125,8	111,6
166,1	120,3
200,2	127,2
230,8	133,2
258,7	138,3
298	145,2

7. Kai Wang and Robert R. Reeber. Thermal Expansion of Caesium Halides with the CsCl Structure // J. Appl. Cryst. 1995. V. 28. Part 3. P. 306-313. [65]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
20	23,73	200	128,25	500	166,65
25	30,84	293	141	550	173,79
50	73,65	300	143,16	600	180,6
75	95,79	350	145,92	650	190,11
100	106,5	400	150,81	700	193,41
150	118,8	450	159,03		

8. S. P. Upadhyay and M. Kumar. Thermal Expansion and Compression of Alkaline Earth Oxides and Cesium Halides at High Temperature and High Pressure // Phys. Stat. Sol. (b). 1995. V. 191. I. 2. P. 299–305. [66]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
298	137
389	147
460	161
570	179
685	200
730	210



Усредненные данные по теплоемкости и коэффициенту теплового расширения CsCl.

Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	α, 10 <sup>-6</sup> К <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	α, 10 <sup>-6</sup> К <sup>-1</sup>
5	0,57	1,56	180	49,66	124,81
10	2,18	5,43	190	50,02	126,29
15	4,86	12,01	200	50,36	127,66
20	8,73	21,43	210	50,65	129
25	12,94	31,3	220	50,92	130,25
30	16,82	40,95	230	51,15	131,41
35	20,83	50,82	240	51,38	132,61
40	24,41	59,43	250	51,59	133,75
45	27,64	67,32	260	51,79	134,91
50	30,21	73,91	270	51,99	136,06
55	32,65	79,85	280	52,17	137,18
60	34,64	84,6	290	52,36	138,37
65	36,41	89,11	300	52,54	139,48
70	38,05	92,92	310	52,71	140,55
75	39,36	96,16	320	52,89	141,71
80	40,43	98,9	330	53,07	142,84
85	41,38	101,24	340	53,25	144
90	42,31	103,52	350	53,42	145,1
95	43,18	105,6	400	54,23	150,47
100	43,95	107,55	450	55,18	156,93
110	45,12	110,58	500	56,15	163,69
120	46,12	113,28	550	57,31	171,53
130	46,95	115,71	600	58,46	179,13
140	47,68	117,89	650	59,65	187,43
150	48,26	119,77	700	61,15	197,56
160	48,75	121,46	750	62,73	208,19
170	49,26	123,29			

## Первичные данные по теплоемкости CsBr.

1. M. Sorai, Hiroshi Suga and Syuzo Seki. Thermal Properties of Alkali Halide Crystals with the CsCl-type Structure. I. Construction of a Calorimeter for the Temperature Region 1-20°K and Heat Capacities of Caesium Bromide and Caesium Iodide between 1.5 and 300°K \\ Bulletin of the Chemical Society of Japan. 1967. Vol. 41. N.2. p. 312-321. [67]

T, К	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	T, К	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	T, К	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	T, К	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>
2,810	0,025	11,993	3,453	20,663	13,460	125,088	48,212
3,242	0,040	12,160	3,585	21,701	14,682	127,231	48,350
3,358	0,044	12,280	3,684	22,830	16,251	129,365	48,380
3,493	0,050	12,439	3,834	23,538	17,142	131,490	48,522
3,757	0,062	12,663	4,075	26,014	19,757	133,651	48,564
3,877	0,068	12,849	4,170	27,777	21,782	135,848	48,664
4,282	0,093	12,981	4,389	29,869	24,033	138,037	48,752
4,688	0,123	13,607	4,962	31,726	25,778	140,219	48,840
4,699	0,125	13,924	5,314	33,899	27,769	142,394	48,911
4,913	0,148	14,200	5,561	36,103	29,631	144,564	48,903
5,101	0,166	14,243	5,669	38,164	31,129	146,727	49,103
5,258	0,185	14,510	5,920	40,392	32,614	148,884	49,195
5,270	0,187	14,571	5,975	42,985	33,916	151,083	49,308
5,476	0,211	14,822	6,209	45,659	35,317	153,324	49,400
5,711	0,242	14,869	6,322	48,566	36,543	155,560	49,384
5,920	0,276	15,100	6,607	51,336	37,577	158,599	49,551
6,107	0,308	15,108	6,540	53,995	38,606	161,082	49,572
6,323	0,348	15,402	6,987	56,563	39,510	164,449	49,526
6,562	0,397	15,561	7,058	59,396	40,547	171,132	49,806
6,774	0,446	15,714	7,330	62,062	41,338	174,506	49,785
6,950	0,494	15,864	7,452	64,980	42,137	179,759	49,911
6,968	0,498	15,997	7,715	68,140	42,773	183,056	49,978
7,183	0,564	16,171	7,757	71,207	43,263	186,345	50,062
7,254	0,587	16,295	8,058	74,250	43,773	189,527	50,149
7,417	0,640	16,481	8,201	77,215	44,283	192,899	50,246
7,519	0,679	16,601	8,368	80,127	44,752	196,214	50,271
7,753	0,763	16,798	8,665	81,534	44,991	199,570	50,380
7,966	0,849	17,099	8,904	82,992	45,179	202,918	50,413
8,177	0,937	17,110	9,042	83,496	45,576	206,259	50,463
8,388	1,032	17,233	9,134	85,516	45,610	209,612	50,526
8,601	1,127	17,374	9,364	87,559	45,953	212,980	50,618
8,815	1,229	17,644	9,632	89,586	46,129	216,340	50,739

9,029	1,346	17,753	9,694	91,594	46,246	219,523	50,798
9,265	1,474	17,913	9,966	93,647	46,363	222,865	50,932
9,494	1,605	17,966	10,071	95,747	46,468	226,300	50,982
9,705	1,739	18,119	10,255	97,832	46,622	229,626	51,057
10,158	2,026	18,439	10,711	99,903	46,790	232,944	51,166
10,404	2,192	18,760	11,134	101,963	46,903	236,252	51,267
10,548	2,286	19,053	11,447	104,011	47,045	239,583	51,350
10,610	2,348	19,091	11,565	106,047	47,170	247,602	51,262
10,659	2,379	19,260	11,690	108,113	47,338	251,128	51,342
10,786	2,504	19,357	11,866	110,207	47,442	254,645	51,359
10,913	2,566	19,373	11,774	112,290	47,589	258,323	51,434
11,031	2,653	19,426	11,933	114,363	47,710	262,142	51,501
11,086	2,716	19,747	12,088	116,427	47,790	265,933	51,572
11,170	2,770	20,318	12,782	118,771	48,011	269,715	51,626
11,429	3,008	20,346	13,154	120,832	48,053	270,987	51,651
11,962	3,382	20,645	13,498	122,935	48,145	278,834	51,727

2. Из справочника: Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание. В 4-х томах. Том IV. М.: Наука, 1981. Книга 1 – 623 с.; Книга 2 – 560 с. [56]

Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>
100	47,03	600	57,001
200	51,04	700	58,35
298,15	52,93	800	59,699
300	52,955	900	61,048
400	54,304	910	61,183
500	55,652		

3. Rajiv Kohli. Heat capacity and thermodynamic properties of alkali metal compounds. Part 8. Cesium and rubidium halides // Thermochimica Acta. 1994. V. 237. I. 2. P. 247–252. [68]

Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>
310	52,2	480	54,76	650	56,95
330	52,54	500	55,01	680	57,35
350	52,82	530	55,4	700	57,61
380	53,21	550	55,71	730	57,99
400	53,59	580	56,1	750	58,21
430	53,9	600	56,37	780	58,55
450	54,32	630	56,75		

Первичные данные по коэффициенту теплового расширения CsBr.

1. Johnson J W, Agron P A and Bredig M A. Molar Volume and Structure of Solid and Molten Cesium Halides // J. Am. Chem. Soc. 1955. V. 77.N.10. P. 2734-2737. [69]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
273	111,9	723	204
323	122,4	773	214,2
373	132,9	823	223,5
473	153,6	873	233,1
573	174,3	898	238,2
673	194,4		

2. Krishnan, R. S. & Srinivasan, R.. Thermal Expansion of Caesium Bromide // Proc. Phys.Soc. 1956. B. V. 69, N. 6. P. 679-682. [70]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
273	139,8
323	146,7
373	153,3
473	165,6
573	177

3. Pathak P. D., Pandya, N. V. Thermal Expansion of some Alkali Halides by X-ray Diffraction// Indian J. Phys. 1960 V. 34. pp. 416-423. [71]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
273	139,8	673	188,4
323	145,8	723	193,8
373	151,8	773	199,8
473	164,1	823	205,5
573	176,4	873	210,6

4. G. K. White. The Thermal Expansion of Alkali Halides at Low Temperatures// Royal Soc. 1965. V. 286. N. 1405. P. 204-217. [72]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
4	0,186	14	12,9	28	54,3
5	0,375	16	18,3	30	60
6	0,69	18	24,3	57,5	98,7
7	1,32	20	30	65	105,6
8	2,1	22	36	75	110,1
10	4,65	24	42	85	113,7
12	8,25	26	48	283	141,3

5. Bailey A C and Yates B. The Low Temperature Thermal Expansion and Related Thermodynamic Properties of Alkali Halides with a Caesium Chloride Structure// Philos. Mag. 1967 .V. 16. I. 144. P. 1241-1248. [59]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
25	43,5	140	124,5
30	58,5	160	127,5
40	78	180	130,2
50	90,6	200	132,9
60	99	220	135
80	110,4	240	137,4
100	116,4	260	139,2
120	120,9	270	140,1

6. P. D. Pathak and N.G.Vasavada. Thermal Expansion of NaCl, KCl and CsBr by X-ray Diffraction and the Law of Corresponding States//Acta Cryst. 1970. A26. P. 655-658. [73]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
273	136,8	673	185,4
323	143,1	723	191,4
373	149,4	773	202,8
473	161,7	823	218,4
573	173,7	873	238,5

7. K.K. Srivastava, H.D. Merchant. Thermal expansion of alkali halides above 300°K // J. Phys. Chem. Solids 1973. V. 34. I. 12. P. 2069–2073. [62]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
298	138
400	153
600	181
800	209
900	222

8. G. K. White and J. G. Collins The Thermal Expansion of Alkali Halides at Low Temperatures // Proc. R. Soc. Lond. F. 1973. V.333. N.1593. P. 237-259. [74]

T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
1,85	0,02	5,95	0,70	11,60	7,40	24,83	44,88
2,42	0,04	6,34	0,92	12,74	9,91	26,48	49,47
3,05	0,08	6,76	1,14	13,94	12,80	27,82	53,13
3,59	0,13	7,21	1,46	15,13	15,94	29,17	56,55
4,03	0,19	7,77	1,92	16,48	19,82	57	98,1
4,40	0,25	8,40	2,50	18,04	24,35	65	104,4
4,81	0,34	9,09	3,31	19,63	29,20	75	109,5
5,24	0,45	9,80	4,30	21,23	34,05	85	113,4
5,61	0,58	10,62	5,59	23	39,36	283	139,5

9. Из справочника: Новицкий Л.А., Кожевников И.Г. Теплофизические свойства материалов при низких температурах. Справ. изд., М.: Машиностроение. 1975. 216 с. [75]

T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
5	0,375	80	111,9	160	123,3	240	135
10	4,5	90	114,6	170	124,8	250	136,5
20	30	100	115,8	180	126,3	260	138
30	60	110	117	190	127,8	273	139,8
40	72,6	120	118,2	200	129,3	280	140,7
50	86,1	130	119,1	210	130,8	290	142,2
60	99	140	120,3	220	132,3	300	142,8
70	107,7	150	121,8	230	133,8		

10. Touloukian Y.S., Kirby R.K., Taylor R.E., Lee T.Y.R. Thermophysical Properties of Matter – The TPRC Data Series. V. 13. Thermal expansion – Nonmetallic Solids. NY–Washington: IFI/Plenum. 1977. 1800 p. [63]

T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
2	0,03	50	94,8	250	135,6	600	181,5
5	0,36	75	107,4	293	140,4	700	195,6
10	4,5	100	114,6	350	148,2	800	210
15	15,6	150	123	400	154,5	875	221,4
20	30	200	129,6	500	167,7		

**11.**K. Wang , R. R. Reeber. Thermal Expansion of Caesium Halides with the CsCl Structure// J. Appl. Cryst. 1995. V. 28. P. 306-313. [65]

T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
5	0,3	75	108,78	350	145,38	650	185,55
10	5,22	100	116,16	400	153,06	700	191,43
15	15	150	125,79	450	160,17	750	197,16
20	29,52	200	133,14	500	166,89	800	202,8
25	45,15	293	142,11	550	173,31	850	208,32
50	92,82	300	142,26	600	179,52	900	213,78

**12.**S. P. Upadhyay and M. Kumar. Thermal Expansion and Compression of Alkaline Earth Oxides and Cesium Halides at High Temperature and High Pressure // Phys. Stat. Sol. (b). 1995. V. 191. I.2. P. 299–305. [66]

T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
298	139
396	148
580	176
750	225
886	254

**13.**Из справочника: Физические величины. Справ. Изд. Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. – М.: Энергоатомиздат. 1991. 1232 С. English: Grigoriev I.S. and Meilikhov E.Z. 1997. Handbook of Physical Quantities (New York: CRC Press). [76]

T, K	$\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
30	60
50	86,1
100	115,8
200	129,3
300	139,8
400	156,72
600	183

Усредненные данные по теплоемкости и коэффициенту теплового расширения CsBr.

Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	α, 10 <sup>-6</sup> К <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	α, 10 <sup>-6</sup> К <sup>-1</sup>
5	0,25	0,31	190	50,12	127,88
10	1,95	4,1	200	50,35	129,11
15	6,48	15,3	210	50,53	130,31
20	12,68	29,88	220	50,74	131,46
25	18,69	44,42	230	50,94	132,45
30	24,03	56,84	240	51,13	133,66
35	28,31	67,31	250	51,3	134,71
40	32,02	76,11	260	51,48	135,78
45	35,01	83,67	270	51,65	136,81
50	37,58	90,11	280	51,8	137,67
55	39,53	95,45	290	51,99	138,68
60	41,3	100,07	300	52,14	139,67
65	42,61	103,77	310	52,31	140,76
70	43,71	106,66	320	52,45	141,75
75	44,58	109,01	330	52,58	142,76
80	45,25	110,8	340	52,77	143,82
85	45,75	112,12	350	52,92	144,77
90	46,28	113,64	400	53,68	150,1
95	46,67	114,76	450	54,35	155,63
100	46,98	115,89	500	55,04	161,27
110	47,5	117,44	550	55,73	167,28
120	48,03	118,98	600	56,4	172,92
130	48,46	120,39	650	57,12	179,23
140	48,81	121,81	700	57,85	185,95
150	49,13	123,03	750	58,58	192,64
160	49,42	124,34	800	59,31	200,26
170	49,69	125,62	850	60,14	208,12
180	49,92	126,6	900	61,05	216,66



## Первичные данные по теплоемкости CsI.

1. A. R. Taylor, Jr., T. E. Gardner, and D. F. Smith. Thermodynamic Properties of Cesium Chloride and Cesium Iodide from 0° to 300°K // U. S. Bureau of Mines Report N. RI-6157. 1963.7 p.[53]

<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
13,51	8,07	57,62	43,42	142,77	50,22
5,52	11,18	58,5	43,62	152,63	50,48
17,06	13,51	60,64	44,10	162,78	50,71
19,8	17,82	63,31	44,64	172,45	50,93
23,39	22,84	63,99	44,78	181,69	51,10
26,24	26,25	66,4	45,20	191,87	51,32
28,92	29,12	69,62	45,58	201,94	51,52
31,53	31,53	73,59	46,05	207,13	51,61
34,83	34,19	77,49	46,61	213,72	51,71
38,73	36,62	81,14	47,06	224,08	51,79
42,27	38,38	85,71	47,58	230,28	51,89
45,53	39,75	91,11	47,92	239,24	52,02
47,45	40,48	96,33	48,22	250,06	52,15
48,59	40,80	101,42	48,51	259,14	52,31
49,12	41,02	106,39	48,71	269,17	52,42
51,48	41,86	115,66	49,14	278,63	52,52
52	41,98	124,97	49,61	288,16	52,76
54,74	42,76	133,98	49,94	298,39	52,86

2. M. Sorai, Hiroshi Suga and Syuzo Seki. Thermal Properties of Alkali Halide Crystals with the CsCl-type Structure. I. Construction of a Calorimeter for the Temperature Region 1-20°K and Heat Capacities of Caesium Bromide and Caesium Iodide between 1.5 and 300°K \\ Bulletin of the Chemical Society of Japan. 1967. V. 41. N.2. p. 312-321. [67]

<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
<b>Calorimeter A</b>					
1,501	0,006	3,983	0,129	10,793	4,045
1,760	0,011	4,136	0,141	11,025	4,318
1,931	0,014	4,364	0,168	11,182	4,494

2,091	0,018	4,546	0,196	11,281	4,644
2,175	0,019	4,594	0,201	11,307	4,703
2,249	0,022	4,830	0,240	11,580	5,038
2,309	0,023	5,074	0,284	11,646	5,088
2,440	0,027	5,373	0,349	11,807	5,314
2,557	0,032	5,430	0,363	11,933	5,389
2,568	0,032	5,816	0,462	12,136	5,657
2,694	0,037	6,207	0,576	12,322	5,832
2,709	0,039	6,321	0,616	12,752	6,389
2,817	0,043	6,578	0,703	13,266	7,121
2,860	0,045	6,910	0,843	13,862	8,012
2,947	0,049	6,956	0,863	14,473	8,954
3,016	0,054	7,366	1,077	15,361	10,364
3,090	0,057	7,480	1,136	15,514	10,573
3,186	0,063	7,857	1,372	16,203	11,673
3,239	0,065	8,150	1,575	16,572	12,234
3,244	0,066	8,358	1,723	17,057	13,021
3,361	0,075	8,835	2,099	17,108	13,071
3,408	0,078	8,901	2,149	17,901	14,263
3,546	0,088	9,330	2,518	18,708	15,502
3,604	0,093	9,643	2,818	19,492	16,585
3,737	0,105	9,806	2,979	20,272	17,769
3,805	0,111	10,255	3,444	20,703	18,539
3,931	0,122	10,725	3,944		

Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>
<b>Calorimeter B</b>					
15,269	9,431	102,574	48,392	181,382	50,844
17,282	13,422	104,999	48,568	183,823	50,802
19,286	16,485	107,396	48,748	186,086	50,848
19,335	16,518	109,776	48,852	188,516	50,781
20,954	18,987	112,143	48,936	190,938	50,936
21,098	19,146	116,913	49,221	193,357	50,823
29,433	29,116	119,414	49,200	195,772	50,911
32,083	31,522	121,895	49,371	199,057	51,183
34,817	33,618	124,363	49,409	201,488	50,974
37,465	35,476	126,815	49,601	203,920	51,028
39,974	36,886	129,252	49,568	206,355	51,041
42,342	38,016	131,677	49,589	208,783	51,158
44,615	38,949	134,089	49,681	211,250	51,175
46,999	39,861	136,490	49,852	213,755	51,350
49,465	40,710	138,883	50,041	218,758	51,292
51,847	41,417	141,267	49,965	221,420	51,417
54,154	42,099	143,639	50,074	224,082	51,472

56,399	42,664	146,003	50,187	232,026	51,626
58,589	43,309	21,271	19,167	234,666	51,693
60,731	43,915	22,816	21,581	237,311	51,660
62,892	44,422	24,755	24,087	239,951	51,848
65,077	44,857	24,954	24,355	245,927	51,957
67,166	45,271	25,903	25,472	248,553	52,007
69,502	45,438	27,027	26,598	251,183	51,882
71,803	45,702	148,358	50,241	253,813	51,865
74,159	46,154	150,704	50,388	256,438	52,091
76,573	46,459	154,228	50,505	264,190	52,091
78,953	46,555	156,730	50,388	266,805	52,208
80,265	47,003	159,219	50,472	272,474	52,497
81,396	46,865	161,703	50,547	275,074	52,513
83,903	47,158	164,183	50,417	277,674	52,555
86,380	47,484	166,652	50,497	281,569	52,354
90,226	47,882	169,120	50,455	287,186	52,400
92,733	47,986	171,584	50,614	293,218	52,497
95,220	48,095	174,041	50,555	299,212	52,589
97,670	48,267	176,492	50,702		
100,119	48,371	178,939	50,844		

3. B. J. Marshall and J. R. Kunkel. Heat Capacity and Elastic Constants of CsI at Low Temperatures// Journal of Applied Physics. 1969. V. 40 N. 13. p. 5191. [42]

<b>T, K</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>	<b>T, K</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
2,13	0,02	4,70	0,22
2,19	0,02	4,96	0,28
2,40	0,03	6,01	0,57
2,55	0,03	6,62	0,86
2,82	0,04	7,57	1,40
2,84	0,05	8,45	2,05
3,30	0,07	9,00	2,59
4,20	0,15	10,00	3,56
4,53	0,19		

4. Из справочника: Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание. В 4-х томах. Том IV. М.: Наука, 1981. Книга 1 – 623 с.; Книга 2 – 560 с. [56]

<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
100	48,41
200	51,21
298,15	52,47
300	52,477
400	53,013
500	54,278
600	56,496
700	59,744
800	64,054
900	69,441
905	69,739

5. Yoichi Takahashi, Yuji Kohsaka. Heat Capacity and Enthalpy of Cesium Iodide from 300 to 830 K // Journal of Nuclear Materials. 1985. V.130. p. 109-114. [78]

<b>Т, К</b>	<b>С, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
298,15	52,66
300	52,69
400	54,38
500	56,27
600	58,5
700	61,05
800	63,85
899	66,74

Первичные данные по коэффициенту теплового расширения CsI.

1. Bailey A C and Yates B. The Low Temperature Thermal Expansion and Related Thermodynamic Properties of Alkali Halides with a Caesium Chloride Structure// Philos. Mag. 1967 .V. 16. I. 144. P. 1241-1248.[59]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
25	56,7	140	129
30	68,7	160	131,7
40	89,4	180	133,8
50	101,1	200	136,2
60	108	220	138,6
80	116,7	240	141
100	122,1	260	143,1
120	126	270	144,3

2. K.K. Srivastava, H.D. Merchant. Thermal expansion of alkali halides above 300°K // J. Phys. Chem. Solids 1973. V. 34. I. 12. P. 2069–2073. [62]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
298	138
400	151
500	164
600	177
700	189
800	202
894	212

3. G. K. White and J. G. Collins. The Thermal Expansion of Alkali Halides at Low Temperatures // Proc. R. Soc. Lond. F. 1973. V.333. N.1593. P. 237-259. [74]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
2,332	0,0603	5,206	0,744	10,605	8,817	24,114	55,89
2,881	0,1125	5,581	0,945	11,605	11,517	25,623	61,35
3,279	0,1731	5,917	1,161	12,682	15,21	27,149	65,28
3,575	0,2175	6,292	1,446	13,829	18,9	57,5	107,43
3,854	0,279	6,709	1,833	15,03	23,55	65	112,74
4,007	0,321	7,176	2,322	16,339	28,32	75	116,79
4,199	0,369	7,722	3,03	17,825	34,02	85	120,45
4,44	0,435	8,354	3,987	19,386	40,08	283	144
4,705	0,534	9,032	5,178	20,95	45,72		
4,875	0,594	9,744	6,669	22,611	51,81		

4. Touloukian Y.S., Kirby R.K., Taylor R.E., Lee T.Y.R. Thermophysical Properties of Matter – The TPRC Data Series. Thermal expansion – Nonmetallic Solids. NY–Washington: IFI/Plenum. 1977. V. 13. 1800 p. [63]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
2	0,039	200	134,4
5	0,66	250	139,5
10	7,5	293	144,9
15	23,4	350	151,5
20	42	400	158,1
25	60	500	172,2
50	108	600	186
75	117,3	700	201
100	124,5	800	216
150	130,5	850	224,1

5. K. Wang , R. R. Reeber. Thermal Expansion of Caesium Halides with the CsCl Structure // J. Appl. Cryst. 1995. V. 28. Part 3. P.306-313. [65]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
5	0,6	150	130,8	550	177,63
10	8,1	200	137,28	600	183,9
15	22,68	293	144,33	650	190,05
20	41,19	300	144,69	700	196,08
25	58,41	350	149,91	750	201,99
50	102,18	400	157,38	800	207,78
75	115,29	450	164,43	850	213,48
100	121,74	500	171,15		

6. S. P. Upadhyay and M. Kumar. Thermal Expansion and Compression of Alkaline Earth Oxides and Cesium Halides at High Temperature and High Pressure // Phys. Stat. Sol. (b). 1995. V. 191. I. 2. P. 299–305. [66]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
298	146
405	149
510	164
590	179
720	202
815	220
900	234

Усредненные данные по теплоемкости и коэффициенту теплового расширения CsI.

Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	α, 10 <sup>-6</sup> К <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	α, 10 <sup>-6</sup> К <sup>-1</sup>
5	0,18	0,63	190	50,96	134,02
10	2,16	5,8	200	51,12	135,1
15	8,37	21,47	210	51,28	136,11
20	15,52	38,85	220	51,42	137,04
25	22,45	55,69	230	51,59	138,11
30	28,26	70,22	240	51,73	139,01
35	32,72	81,16	250	51,86	140
40	36,16	90,34	260	52,02	140,88
45	38,85	97,44	270	52,14	141,78
50	40,98	102,98	280	52,27	142,62
55	42,55	106,87	290	52,4	143,41
60	43,74	109,95	300	52,54	144,24
65	44,74	112,05	310	52,67	145,18
70	45,65	114,02	320	52,8	146,09
75	46,31	115,71	330	52,91	146,9
80	46,81	117,09	340	53,04	147,72
85	47,37	118,38	350	53,16	149,55
90	47,58	119,47	400	53,81	153,24
95	47,92	120,51	450	54,61	158,28
100	48,25	121,42	500	55,42	164,33
110	48,82	123,28	550	56,36	171,38
120	49,26	124,87	600	57,54	178,7
130	49,61	126,55	650	58,84	186,05
140	49,91	127,94	700	60,42	193,82
150	50,16	129,23	750	61,94	201,65
160	50,4	130,49	800	63,62	209,97
170	50,6	131,74	850	65,3	218,67
180	50,78	132,88	900	67,19	228,32

## Первичные данные по теплоемкости CsF.

1. Arnold M. Karo. Lattice Vibrations in Alkali Halide Crystals. II. Potassium and Rubidium Halides; Cesium Fluoride\\ The Journal of Chemical Physics. 1960. V. 33. I. 1. P. 7. [79]

Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>
5	0,04	50	21,59	180	44,48
10	0,79	60	25,44	200	45,40
15	2,93	70	28,79	220	46,11
20	6,02	80	31,63	240	46,69
25	9,25	90	34,10	260	47,11
30	12,22	100	36,15	280	47,49
35	14,85	120	39,33	300	47,78
40	17,28	140	41,59		
45	19,50	160	43,26		

2. И.Е. Пауков, Ф.С. Рахменкулов. Теплоемкость при низких температурах, абсолютная энтропия и энтальпия при стандартных условиях CsF. // Журн. Физ. Хим, 1969. 43. с. 788. [80]

Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	Т, К	С, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>
13,05	3,17	43,87	22,98	105,94	41,48	197,09	48,49
14,28	4,19	45,31	23,76	113,11	42,30	206,57	48,87
15,46	5,11	48,55	25,45	119,98	43,14	217,21	49,25
16,72	6,07	51,25	26,64	127,16	43,89	227,05	49,50
18,80	7,47	54,92	28,30	137,94	44,94	237,97	49,79
20,20	8,62	56,30	28,51	144,96	45,48	249,61	50,08
20,99	9,24	62,33	30,87	152,39	46,02	263,09	50,38
23,93	11,46	67,89	32,79	161,62	46,61	280,39	50,75
27,53	13,51	73,30	34,46	162,81	46,69	293,22	51,13
30,14	15,17	79,14	36,17	167,45	46,90	295,55	51,04
33,32	17,03	82,71	37,06	174,06	47,24	300,79	51,04
36,36	18,89	90,44	38,86	181,48	47,61		
39,32	20,58	98,28	40,03	189,09	48,12		



3. Alexander.C. Macleod. High-temperature Thermodynamic Properties of the Alkali-metal Fluorides\\ J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1. 1973. V. 69. P. 2026-2035. [81]

<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
300	50,54
400	62,30
500	66,27
600	67,20
700	66,65
780	65,65
976	86,36

4. Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание. В 4-х томах. Том IV. М.: Наука, 1981. Книга 1 – 623 с.; Книга 2 – 560 с. [56]

<b>T, К</b>	<b>C, Дж К<sup>-1</sup> моль<sup>-1</sup></b>
100	40,46
200	48,58
298,15	51,09
300	51,145
400	54,091
500	57,037
600	59,983
700	62,929
800	65,876
900	68,822
976	71,061

5. O. Beneš , R.J.M. Konings , D. Sedmidubský , M. Beilmann , O.S. Valu , E. Capelli , M. Salanne, S. Nichenko . A comprehensive study of the heat capacity of CsF from  $T = 5 \text{ K}$  to  $T = 1400 \text{ K}$  // J. Chem. Thermodynamics. 2013. V 57. P. 92–100. [82]

T, K	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	T, K	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	T, K	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>	T, K	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>
5	0,16	70	34,08	180	47,69	290	50,03
10	1,3	80	36,74	190	48	298,15	50,19
15	4,39	90	38,87	200	48,28	300	50,22
20	8,57	100	40,59	210	48,51	310	50,42
25	12,33	110	42,2	220	48,73	320	50,63
30	15,77	120	43,53	230	48,93	330	50,86
35	18,9	130	44,7	240	49,12	340	51,09
40	21,75	140	45,59	250	49,3	350	51,33
45	24,36	150	46,3	260	49,48		
50	26,72	160	46,86	270	49,66		
60	30,78	170	47,31	280	49,84		
298,15	50,19	450	56,28	650	67,68	850	80,02
300	50,23	500	58,95	700	70,72	900	83,17
350	51,72	550	61,78	750	73,8	950	86,32
400	53,82	600	64,69	800	76,9	973	87,78

6. URL: <http://kinetics.nist.gov/janaf/html/Cs-008.html>. [83]

T, K	C, Дж К <sup>-1</sup> моль <sup>-1</sup>
298,15	51,965
300	52,007
400	53,764
500	55,564
600	57,363
700	59,12
800	60,877
900	62,634
976	63,952

Первичные данные по коэффициенту теплового расширения CsF.

1. G. K. White and J. G. Collins The Thermal Expansion of Alkali Halides at Low Temperatures // Proc. R. Soc. Lond. F. 1973. V.333. N.1593. P. 237-259. [74]

<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>	<b>T, K</b>	<b><math>\alpha, 10^{-6} \text{ K}^{-1}</math></b>
3	0,0054	20	7,35
4	0,0135	22	9,09
5	0,0285	24	10,89
6	0,06	28	14,7
7	0,126	30	16,65
8	0,249	57,5	43,95
9	0,444	65	52,05
12	1,56	75	57,72
14	2,76	85	64,05
16	4,2	283	101,55
18	5,73		